



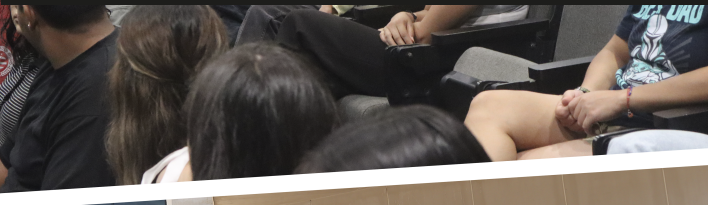
 Diálogos Académicos

UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA · CENTRO UNIVERSITARIO DE LOS LAGOS

CIENCIA DESDE LOS ALTOS NORTE DE JALISCO

Formando vocaciones científicas
en el CULagos, 2023

Jesús Ricardo Sevilla Escoboza
(coordinador)



☞ Diálogos Académicos

CIENCIA DESDE LOS ALTOS NORTE DE JALISCO.

Formando vocaciones científicas
en el CULagos, 2023

CIENCIA DESDE LOS ALTOS NORTE DE JALISCO.

Formando vocaciones científicas
en el CULagos, 2023

Jesús Ricardo Sevilla Escoboza
(coordinador)



Universidad de Guadalajara

Mtra. Karla Alejandrina Planter Pérez
Rector General

Dr. Héctor Raúl Solís Gadea
Vicerrector Ejecutivo

Mtro. César Antonio Barba Delgadillo
Secretario General

Dra. Gloria Angélica Hernández Obledo
Rectora del Centro Universitario de los Lagos

Dra. Karla Noemí Padilla Martínez
Secretaria Académica

Dra. Irma Estela Guerra Márquez
Jefa del Laboratorio Editorial

Primera edición, 2025

ISBN: 978-607-581-530-5

D. R. © Universidad de Guadalajara

CENTRO UNIVERSITARIO DE LOS LAGOS

Av. Enrique Díaz de León 1144, Col. Paseos de la Montaña, C.P. 47460
Lagos de Moreno, Jalisco, México
Teléfono: +52 (474) 742 4314, 742 3678 Fax Ext. 66527
<http://www.lagos.udg.mx/>



Este trabajo está autorizado bajo la licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND) lo que significa que el texto puede ser compartido y redistribuido, siempre que el crédito sea otorgado al autor, pero no puede ser mezclado, transformado, construir sobre él ni utilizado con propósitos comerciales. Para más detalles consulte <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.es>

Editado en México / Edited in Mexico

Ciencia desde los Altos Norte de Jalisco.
Formando vocaciones científicas en el CULagos, 2023,
se editó para publicación electrónica en abril de 2025 en
CULagos Ediciones
Av. Enrique Díaz de León 1144, Col. Paseos de la Montaña, C.P. 47460
Lagos de Moreno, Jalisco, México
Teléfono: +52 (474) 742 4314, 742 3678
<http://www.lagos.udg.mx/>

Comité editorial: Dra. Irma Estela Guerra Márquez
Cuidado del texto: Judith Gómez González
Diseño cubierta: Alma Alejandra Montiel Meza
Diagramación: Raúl Alejandro Zamora Zamora
Imagen de cubierta: Collage de fotografías tomadas por la Coordinación
de Extensión del Centro Universitario de los Lagos

La presente publicación pasó por un proceso de dos dictámenes (doble ciego) de pares académicos, miembros del Sistema Nacional de Investigadoras e Investigadores del CONAHCyT, avalados por el Comité Editorial del Centro Universitario de los Lagos de la Universidad de Guadalajara, mismo que reconoce su valor como un libro de texto apropiado para un público diverso de lectores.

Prólogo

A 20 años de creación, hoy en día la comunidad del Centro Universitario de los Lagos (CULagos) sigue comprometida con su vocación científica y el impacto que ésta tiene en la región Altos Norte de Jalisco. En estos veinte años, nuestro desarrollo ha presentado diversos retos, siendo uno de ellos el mantenernos a la vanguardia de los modelos educativos y la formación multidisciplinar, con el fin de ser la mejor opción educativa para la población de nuestra zona de influencia.

Sin lugar a dudas, nuestra marca distintiva es el fomento la investigación temprana, así como la formación de vocaciones científicas; tenemos la certeza de que, el dotar a nuestras y nuestros alumnos de herramientas suficientes en el campo de la investigación durante su periodo formativo, les proveerá capacidades disruptivas que permitirán integrar nuevos conocimientos y dar soluciones a los más diversos problemas.

Este libro es el resultado de una nueva estrategia para posicionar a la investigación temprana como un elemento integrador de técnicas y conocimientos, además de ser un ejercicio de transparencia académica y fuente para difundir el conocimiento generado en nuestro centro universitario por nuestras y nuestros alumnos bajo la asesoría de una vibrante comunidad de investigadoras e investigadores.

No debemos dejar de lado uno de los grandes retos que enfrentamos en la actualidad las Instituciones de Educación Superior (IES): la formación integral y pertinente de los nuevos profesionistas que se integren en la comunidad productiva y que al mismo tiempo sean ciudadanos comprometidos con la cultura de paz; es decir que, además de fomentar habilidades propias de su carrera, deberán desarrollar nuevas destrezas que incidan en la capacidad de innovación y la integración de conocimiento para la solución de problemas en sus comunidades.

Cada uno de los 25 capítulos de este libro surgen como productos finales de la Convocatoria del IX Verano Científico, la cual está dirigida a estudiantes e investigadores del CULagos y de otras IES, interesados en realizar estancias de investigación, ya sea en modalidad virtual o presencial, bajo tres acciones fundamentales:

1. Impulsar la investigación científica y humanística, el desarrollo tecnológico, el arte, la cultura, el deporte y la educación física, en los ámbitos internacional, nacional, regional, estatal, municipal y comunitario.
2. Contribuir a la preservación, enriquecimiento y difusión de los bienes y valores de las diversas culturas.
3. Acercar a las y los estudiantes a las distintas fases de la experiencia de investigación, que van desde la experimentación, el análisis de datos, la documentación, el análisis crítico hasta la discusión académica en torno a un reto en particular.

En esta obra, se han incluido textos únicos de distintas áreas del conocimiento, englobando temas como: ergonomía, principios físico-químicos de materiales usados en la fabricación de celdas fotovoltaicas, gamificación, análisis de suelos, experimentos de física, reingeniería de materiales contaminantes, inteligencia artificial, accesibilidad e inclusión, tutoriales para autoenseñanza, análisis de procesos sociales y fabricación y aprovechamiento de nuevos materiales. En esencia, esta es sólo una muestra del carácter multidisciplinario del trabajo de investigación que se realiza en nuestro centro universitario, y da cuenta de un compromiso latente con la generación de conocimiento como línea conductora de nuestros esfuerzos.

Esperamos que obras como la presente sigan incentivando la práctica de la investigación en nuestra comunidad, uno de los ejes fundamentales que vertebran la razón de la existencia del CULagos, y que estas páginas sean un espacio confiable de encuentro con la ciencia, la innovación y el conocimiento.

Dra. Gloria Angélica Hernández Obledo
Rectora del Centro Universitario de los Lagos

Capítulos

Análisis in silico de las propiedades intramoleculares e intermoleculares de interfaces donador-aceptor en celdas solares orgánicas: El caso de los sistemas BO-5F y BO-5Cl

JATZIRI GUADALUPE NORIEGA RODRÍGUEZ
jatziri.noriega9665@alumnos.udg.mx

ALESSANDRO ROMO GUTIÉRREZ
alessandro.romo@academicos.udg.mx

RESUMEN

Este trabajo incluye un análisis de algunas propiedades electrónicas de los sistemas aceptores de electrones BO-5F y BO-5Cl, que se derivan de sus homólogos BO-4F y BO-4Cl. La variación en el número de halógenos desde 4 hasta 5 surge de la búsqueda de una comparación con respecto a los sistemas originales y además del estudio preliminar de las características electrónicas de los sistemas propuestos para prever su comportamiento a nivel experimental. Los resultados encontrados revelan tendencias interesantes que siguen todos los descriptores analizados en esta investigación: que el aceptor clorado es mejor que su similar fluorado. Muestra de ello son los mayores índices de aceptación de carga, las menores energías de reorganización para electrones, la energía de unión del excitón más favorable y los picos de absorción hacia longitudes de onda más grandes para dicha molécula.

PALABRAS CLAVE

Celdas solares orgánicas (organic solar cells), DFT (Density Functional Theory), Fotovoltaica orgánica (organic photovoltaics), Aceptor de electrones (electron acceptor), Heterounión en volumen (bulk heterojunction)

INTRODUCCIÓN

Las celdas solares son conocidas por ser capaces de captar y convertir la radiación solar en energía eléctrica, y su uso cotidiano es en los hogares o

negocios. Son fabricadas normalmente con materiales semiconductores de silicio. Estos materiales al contacto con los fotones de la radiación solar, desplazan los electrones creando así la corriente directa (Estrada et al., 2022). Las celdas solares orgánicas —OSC, por sus siglas en inglés— son una clase de dispositivos fotovoltaicos que utilizan materiales orgánicos, como polímeros o moléculas orgánicas, en lugar de semiconductores inorgánicos para convertir la energía de la luz solar en electricidad (Yao y Hou, 2022). Estas celdas solares son conocidas por ser ligeras, flexibles y económicamente asequibles, lo que las hace ideales para aplicaciones en las que los paneles solares rígidos no son prácticos (Liang et al., 2022).

Las celdas solares orgánicas están hechas principalmente de dos materiales orgánicos, un donador de electrones y un aceptor de electrones, con estructuras entrelazadas permitiéndonos la transferencia de cargas a través de las redes formadas por dichos materiales. Uno de los problemas encontrados con el uso de las celdas solares orgánicas es la rápida degradación de las moléculas orgánicas por la exposición de la radiación solar, ya que las moléculas orgánicas usadas tienen una fuerte absorción en la región UV del espectro electromagnético (Liu, 2022). Las moléculas de la familia Y6 han demostrado un gran desempeño fotovoltaico. Aunque las celdas solares orgánicas todavía tienen desafíos que superar en términos de eficiencia y durabilidad en comparación con las celdas solares de silicio, ofrecen ventajas únicas en términos de flexibilidad y versatilidad. Se espera que sigan desempeñando un papel importante en la expansión de la energía solar en aplicaciones específicas y en la creación de soluciones innovadoras para la generación de energía sostenible (Wei et al., 2022).

La investigación presentada tiene como objetivo establecer una comparativa de ciertos parámetros electrónicos relacionados con el desempeño fotovoltaico de las celdas solares orgánicas, como lo son los niveles energéticos de transporte u orbitales moleculares de frontera, los índices de aceptación de carga y las características de absorción de los materiales en diversos ambientes. Asimismo, se propone un nuevo par de moléculas que aún no han sido sintetizadas tomando como base la estructura de los aceptores BO-4F y BO-4Cl, lo que permite el estudio preliminar de sus propiedades para conocer su viabilidad en un posible terreno experimental.

MATERIALES Y MÉTODOS

Se realizaron cálculos cuánticos y simulaciones asistidas por computadora mediante software especializado para la química computacional. Para estas se utilizó el programa *Gaussian16* (Frisch et al., 2016) y previamente su interfaz gráfica *GaussView6* (Dennington et al., 2016) para construir los modelos de las estructuras moleculares BO-5F y BO-5Cl. Se obtuvieron algunos parámetros de estructura electrónica como el momento dipolar, la energía de los orbitales moleculares de frontera y sus isosuperficies, los descriptores de donación (potencial de ionización, poder electrodonador) y de aceptación de carga (afinidad electrónica, poder electroceptor), las energías de reorganización y la energía de unión del excitón. Además, se obtuvo el espectro de absorción en la región ultravioleta-visible en fase gaseosa, cloroformo y clorobenceno y se interpretaron los picos principales de absorción. Los cálculos computacionales se enmarcaron en la Teoría del Funcional de la Densidad (Hohenberg, P. y Kohn, W., 1965), empleando el funcional de intercambio y correlación B3LYP y el conjunto de funciones base 6-311G(d,p).

La estimación de los índices globales de donación y aceptación se condujo mediante las ecuaciones (1) y (2) (Gázquez et al., 2007), siendo $\chi^- = (3I+A)/4$ y $\chi^+ = (3A+I)/4$.

$$(1) \quad \omega^- = \frac{(\chi^-)^2}{I-A},$$

$$(2) \quad \omega^+ = \frac{(\chi^+)^2}{I-A},$$

Además, en las ecuaciones (1) y (2), I es la primera energía de ionización vertical y A es la afinidad electrónica vertical de la molécula, cada una calculada mediante

$$(3) \quad I = E(N - 1) - E(N),$$

$$(4) \quad A = E(N) - E(N + 1).$$

En las expresiones (3) y (4), $E(N)$ es la energía del sistema optimizado en estado neutro, $E(N-1)$ representa la energía del catión de la misma estructura y $E(N+1)$ alude a la energía del anión.

La energía de reorganización, a su vez, se calculó con ayuda del método de los 4 puntos de Nelsen (Nelsen,1993)

$$(5) \quad \lambda_- = [E_0^- - E_-] + [E_-^0 - E_0],$$

$$(6) \quad \lambda_+ = [E_0^+ - E_+] + [E_+^0 - E_0].$$

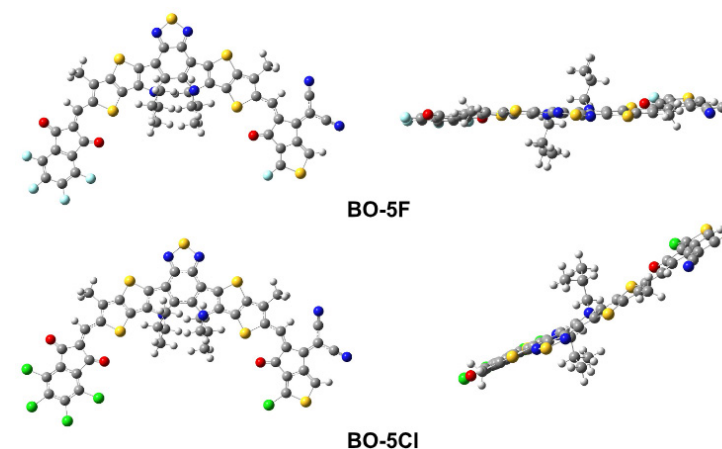
Aquí, el subíndice se refiere a la geometría con la que se optimizó la molécula —aniónica, catiónica o neutra— y el superíndice alude a la carga con la que se obtuvo la energía.

Los principales picos de absorción se obtuvieron con ayuda de cálculos TD-DFT (Teoría del Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo) (Runge y Gross, 1984) echando mano de la misma metodología utilizada para los cálculos en estado fundamental (B₃LYP/6-311G(d,p)). Para ello se tomaron en cuenta 10 estados excitados. La energía de unión del excitón se obtuvo mediante software Multiwfn (Lu y Chen, 2012) empleando los archivos de salida de los cálculos con estados excitados.

RESULTADOS

La Figura 1 muestra las estructuras optimizadas de los aceptores BO-5F y BO-Cl. Cabe destacar que dichas estructuras se validaron con ayuda de un cálculo de frecuencias, descartando la presencia de frecuencias vibracionales imaginarias bajo el modelo armónico.

Figura 1. Estructuras de mínima energía de los aceptores de electrones BO-5F y BO-5Cl.

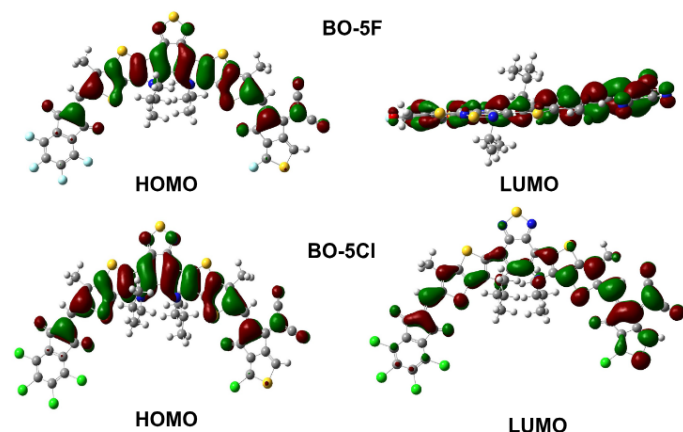


Nota. Vista frontal (izquierda) y lateral (derecha).

La Figura 2 muestra la distribución de los orbitales HOMO y LUMO de cada una de las moléculas analizadas. Como vemos, las gráficas de las isosuperficies representativas de los valores HOMO tienen una tendencia a estar en el centro en ambas moléculas, mientras los valores LUMO su tendencia es estar en las colas de ambas moléculas. Esta observación da cuenta de los posibles sitios de ataque nucleofílico y electrofílico en los aceptores, respectivamente. La información visual de la Figura 2 se complementa con la Tabla 1, que contiene la información relativa a la energía de los orbitales moleculares de frontera y a la diferencia energética entre ambos. Como se puede observar, los valores HOMO y LUMO en la molécula BO-5Cl son más negativos en comparación con su contraparte BO-5F, mientras el valor del gap en la molécula BO-5Cl es más pequeño. Estos dos aspectos podrían beneficiar a la molécula BO-5Cl en una hipotética

interfaz de una celda solar orgánica porque posiciones más bajas del orbital LUMO del sistema aceptor incrementar el voltaje en circuito abierto de la fotocelda (Guo et al., 2022).

Figura 2. Isosuperficies de los orbitales HOMO y LUMO de BO-5F y BO-5Cl.



Nota. Isovalor = 0.02.

Tabla 1. Energía de los orbitales moleculares de frontera (eV) de los sistemas BO-5F y BO-5Cl.

Molécula	HOMO	LUMO	gap HOMO-LUMO
BO-5F	-5.58	-3.86	1.71
BO-5Cl	-5.59	-3.89	1.70

En la Tabla 2 se aprecia un compendio de las propiedades de aceptación y donación de las moléculas BO-5F y BO-5Cl. La molécula BO-5Cl tiene una mayor afinidad electrónica (A) y un mejor poder electroceptor (ω^+), con un valor de 2.90 eV (A) y 3.14 eV (ω^+) en comparación con la molécula BO-5F, que tiene valores de 2.86 eV (A) y 3.8 (ω^+). Esto es un indicador de que el sistema BO-5Cl es un mejor aceptor de electrones que BO-5F y que muestra una mayor afinidad por los portadores de carga negativa que su similar fluorado.

Tabla 2. Propiedades de donación y aceptación de carga (eV) de las moléculas BO-5Cl y BO-5F.

Molécula	I	A	χ^-	χ^+	ω^-	ω^+
BO-5Cl	9.50	2.90	7.85	4.55	9.35	3.14
BO-5CF	9.46	2.86	7.811	4.51	9.24	3.08

La Tabla 3 muestra los datos espectroscópicos calculados para el pico de mayor absorción de luz en las moléculas BO-5F y BO-5Cl. La información presentada sugiere que el espectro de absorción tendría un desplazamiento de las bandas de absorción de la molécula BO-5Cl hacia longitudes de onda mayores que en BO-5F. Esto podría ser benéfico para la molécula BO-5Cl debido a que la región del cercano infrarrojo es la que presenta mayor irradiancia espectral dentro de todo el espectro solar, es decir, presenta la mayor cantidad de fotones, lo que incrementa la generación de corriente en la celda solar (Reiss, 2023). De igual manera, en la Tabla 3 se observa que al cambiar el solvente trae consigo un desplazamiento hacia el rojo del principal pico de absorción, lo que hace esperar que el desempeño fotovoltaico sea mejor en cloroformo que en fase gaseosa y todavía más en clorobenceno con respecto a los otros dos medios. La fuerza del oscilador (f), que indica la probabilidad de la transición dominante (en este caso, de HOMO a LUMO) es superior para el aceptor BO-5Cl en todos los solventes y también se incrementa al cambiar el medio.

Tabla 3. Datos espectroscópicos de los sistemas BO-5Cl y BO-5F en fase gaseosa, cloroformo y clorobenceno.

Solvente	Molécula	Longitud de onda (nm)	E_{abs} (eV)	f	Transición (orbitales)
Gas	BO-5Cl	670.18	1.850	0.424	HOMO-LUMO (100 %)
Gas	BO-5F	668.24	1.855	0.411	HOMO-LUMO (100 %)
Cloroformo	BO-5Cl	673.32	1.841	0.432	HOMO-LUMO (100 %)
Solvente	Molécula	Longitud de onda (nm)	E_{abs} (eV)	f	Transición (orbitales)
Cloroformo	BO-5F	671.69	1.846	0.416	HOMO-LUMO (100 %)

Continúa sg. pg.

Clorobenceno	BO-5Cl	675.07	1.837	0.429	HOMO-LUMO (100 %)
Clorobenceno	BO-5F	674.13	1.839	0.419	HOMO-LUMO (100 %)

La energía de reorganización para huecos y electrones, así como la energía de unión del excitón, se presentan en la Tabla 4. Como se puede notar, BO-5Cl tiene una menor magnitud de la energía de reorganización para electrones (λ_e) que la de su similar BO-5F, por lo que se esperaría un mejor transporte de electrones en BO-5Cl. Esto, a su vez, indica que la movilidad de portadores de carga negativa sería mejor para el sistema clorado. En cuanto a la energía de unión del excitón, que se refiere a la fuerza con la que se une el hueco y el electrón antes de su disociación, resalta el hecho de que este parámetro también tiene menor magnitud en BO-5Cl que en BO-5F, lo que significa una mayor facilidad para la separación de los portadores una vez formada la excitación, lo que repercute en menores tasas de recombinación.

Tabla 4. Energías de reorganización para huecos y electrones y energía de unión del excitón (eV) en ambos sistemas aceptores.

Molécula	λ_e	λ_h	λ_{total}	E_b
BO-5F	0.165	0.192	0.357	2.39
BO-5Cl	0.162	0.195	0.357	2.31

CONCLUSIONES

Los resultados nos indican que la molécula BO-5Cl es la mejor candidata para ser usada como materia prima de celdas solares orgánicas, esto debido a que en general sus descriptores fueron superiores. Se pudo observar que el valor del gap es muy similar en ambas moléculas, sin embargo, es ligeramente menor en BO-5Cl, lo que podría ayudar en la absorción de luz en longitudes de onda mayores. La información de los principales picos de absorción confirma la captación de luz hacia el rojo de la molécula BO-5Cl cuando se compara con BO-5F. Los índices de aceptación de carga dan cuenta de una mayor afinidad por los electrones y por su transporte en el sistema BO-5Cl, aspecto que se respalda con la menor magnitud de su energía de reorganización y de unión del excitón.

REFERENCIAS

- Dennington, R., Keith, T. A. y Millam, J. M. (2016). *GaussView, version 6.0.16*. Semichem Inc Shawnee Mission KS.
- Estrada Flores, S. L., Garcias-Morales, C., Mirón Velázquez, R. S., Pérez Berumen, C. M. y Cruz Durán, F. N. D. L. (2022). Una introducción a la Electrónica Orgánica. *Educación química*, 33(2), 3-17.
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J.R., ... y Fox, D. J. (2016). *Gaussian 16*. [Software]. Wallingford, CT: Gaussian, Inc.
- Guo, Z., Jena, A. K., Kim, G. M. y Miyasaka, T. (2022). *The high open-circuit voltage of perovskite solar cells: a review*. Energy & Environmental Science.
- Liang, Y., Zhang, D., Wu, Z., Jia, T., Lüer, L., Tang, H., ... y Huang, F. (2022). Organic solar cells using oligomer acceptors for improved stability and efficiency. *Nature Energy*, 7(12), 1180-1190.
- Liu, Y., Li, B., Ma, C. Q., Huang, F., Feng, G., Chen, H., ... y Bo, Z. (2022). Recent progress in organic solar cells (Part I material science). *Science China Chemistry*, 1-45.
- Lu, T., y Chen, F. (2012). Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. *Journal of Computational Chemistry*, 33(5), 580-592.
- Reiss, M. A., Arge, C. N., Henney, C. J., Klimchuk, J. A., Linker, J. A., Muglach, K., ... y Schonfeld, S. J. (2023). *Progress and Challenges in Understanding the Ambient Solar Magnetic Field, Heating, and Spectral Irradiance*. Advances in Space Research.
- Wei, Y., Chen, Z., Lu, G., Yu, N., Li, C., Gao, J., ... y Huang, H. (2022). Binary organic solar cells breaking 19% via manipulating the vertical component distribution. *Advanced Materials*, 34(33), 2204718.
- Yao, H. y Hou, J. (2022). Recent Advances in Single-Junction Organic Solar Cells. *Angewandte Chemie*, 134(37), e202209021.

Análisis in silico de las propiedades intramoleculares e intermoleculares de interfaces donador-aceptor en celdas solares orgánicas: El caso de los sistemas BO-7F Y BO-7Cl

PAMELA JAQUELINE VARGAS MORENO
pamela.vargas@alumnos.udg.mx

ALESSANDRO ROMO GUTIÉRREZ
alessandro.romo@academicos.udg.mx

RESUMEN

En el presente trabajo se plantea un estudio computacional de algunas características electrónicas de dos sistemas aceptores de electrones empleados en celdas solares orgánicas de alta eficiencia. Se obtuvieron parámetros tales como la energía de los orbitales moleculares de frontera, su alineación como niveles de transporte de carga y su gráfica como isosuperficies de densidad electrónica. Asimismo, se caracterizaron los sistemas aceptores en cuestión echando mano de los índices de donación y aceptación de carga, las energías de reorganización y la energía de unión del excitón. Los resultados revelan, de manera general, que la versión clorada (BO-7Cl) de la molécula tiene mejores descriptores teóricos de transporte y aceptación de carga, además de características superiores de absorción de carga que pudieran favorecer a una capa fotoactiva fabricada con dicho material en comparación con la variante fluorada (BO-7F).

PALABRAS CLAVE

Aceptor de electrones (electron acceptor), DFT (Density Functional Theory), Y6, Estructura electrónica (electronic structure), Fotovoltaica orgánica (organic photovoltaics)

INTRODUCCIÓN

Las celdas solares, también conocidas como celdas fotovoltaicas, son dispositivos que convierten la energía de la luz solar en electricidad (Fukuda

et al., 2020). Las celdas solares han recorrido un largo camino desde sus primeros desarrollos en la década de 1950 hasta las modernas tecnologías de hoy en día. La historia de las celdas solares comenzó con el descubrimiento del efecto fotovoltaico por Alexandre-Edmond Becquerel en 1839; sin embargo, las primeras celdas solares prácticas se desarrollaron en la década de 1950 utilizando silicio cristalino (Allen et al., 2019). En la década de 1970, se introdujeron las celdas solares amorfas, que estaban hechas de silicio no cristalino. Las celdas solares de silicio amorfo, aunque eran más baratas de producir que las células de silicio cristalino, tenían una eficiencia energética más baja y se usaban en aplicaciones más limitadas, como relojes y calculadoras solares (Liu et al., 2022).

A lo largo de las décadas de 1980 y 1990, se desarrollaron celdas solares de película delgada utilizando materiales como telururo de cadmio (CdTe) y seleniuro de cobre-indio-galio (CIGS), las cuales permitieron una mayor flexibilidad y eficiencia en la fabricación, lo que las hizo más asequibles y versátiles para su uso en aplicaciones comerciales y residenciales (Dréon et al., 2020).

A finales de la década de 1980 y principios de la de 1990, se iniciaron investigaciones sobre celdas solares orgánicas (OSCs) como una alternativa prometedora. Estas celdas solares utilizan materiales orgánicos basados en polímeros o moléculas orgánicas, en lugar de semiconductores inorgánicos. Esta novedosa clase de fotoceldas ofrece múltiples ventajas, como ser livianas, flexibles y económicas de fabricar a gran escala, aunque su eficiencia energética suele ser más baja en comparación con otras tecnologías de células solares (Hu et al., 2020). Aunado a ello, a lo largo de las últimas décadas ha habido avances significativos en la investigación de OSCs, como el desarrollo de materiales orgánicos más eficientes, por lo que la eficiencia energética de las OSCs ha mejorado considerablemente. Aunque todavía no son tan eficientes como las células solares de silicio, las OSCs son cada vez más utilizadas en aplicaciones específicas, como dispositivos electrónicos portátiles y cargadores solares flexibles (Tong et al., 2016).

La celda solar orgánica consiste fundamentalmente en dos materiales orgánicos en un donador y en un aceptador de electrones permitiendo la transferencia de carga a través de las redes formadas por las fases de materiales de donador y aceptor (Servaites, 2011). Los aceptores orgánicos

se caracterizan por tener una alta afinidad electrónica, gran capacidad para el transporte de electrones y buena absorción de luz en la región visible del espectro (Dai y Zhan, 2018).

Ligado a esto, se reporta en un artículo (Liu et al., 2022) la familia de moléculas aceptoras BO-4X (X = F, Cl), que tienen eficiencias mayores al 18 % en celdas solares orgánicas. Dichas moléculas tienen la capacidad de absorber en regiones amplias del espectro electromagnético y exhiben altas movilidades de los portadores de carga negativa. En este trabajo se pretende analizar el efecto que tiene el usar 7 moléculas de halógeno en lugar de 4, como la molécula original presentada por Liu, Y. y col. (2002), así como establecer una comparación entre las ventajas de usar flúor o cloro en dichos sistemas.

MATERIALES Y MÉTODOS

Se realizaron cálculos y simulaciones computacionales utilizando un *software* especializado en química computacional, específicamente el programa *Gaussian16* (Frisch et al., 2016). Para construir los modelos de las estructuras moleculares BO-7F y BO-7Cl se empleó la interfaz gráfica GaussView6 (Dennington et al., 2016). Los cálculos fueron realizados para obtener diversos parámetros relacionados con la estructura electrónica de las moléculas, incluyendo el momento dipolar, la energía de los orbitales moleculares de frontera y sus isosuperficies, así como los descriptores de donación —como el potencial de ionización y el poder electrodonador— y de aceptación de carga —como la afinidad electrónica y el poder electroceptor—. Adicionalmente, se calcularon las energías de reorganización y la energía de unión del excitón. También se analizó el espectro de absorción en la región ultravioleta visible de las moléculas en fase gaseosa, cloroformo y clorobenceno —concretamente, las transiciones asociadas a los principales picos de absorción en cada caso—. Los cálculos fueron realizados en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad (Hohenberg y Kohn, 1965), al nivel B3LYP/6-311G(d,p).

Para obtener los descriptores de donación y aceptación de carga se emplearon las fórmulas basadas en el modelo de Gázquez (Gázquez et al., 2007)

$$(1) \quad \omega^- = \frac{(x^-)^2}{I-A},$$

$$(2) \quad \omega^+ = \frac{(x^+)^2}{I-A},$$

en donde χ^- , χ^+ , I es la primera energía de ionización calculada por la vía vertical y A es la afinidad electrónica vertical de la molécula:

$$(3) \quad I = E(N-1) - E(N)$$

$$(4) \quad A = E(N) - E(N+1)$$

Aquí, $E(N)$ es la energía del sistema optimizado en estado neutro, $E(N-1)$ representa la energía del catión de la misma estructura y $E(N+1)$ alude a la energía del anión.

La energía de reorganización, por su parte, se calculó mediante las fórmulas (Nelsen, 1993)

$$(5) \quad \lambda_- = [E_0^- - E_-] + [E_-^0 - E_0]$$

$$(6) \quad \lambda_+ = [E_0^+ - E_+] + [E_+^0 - E_0]$$

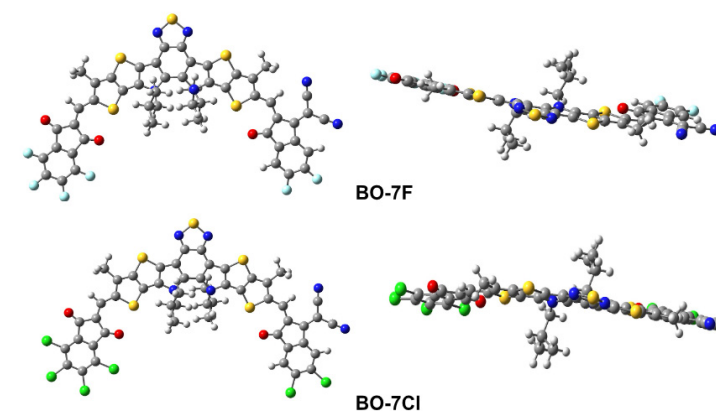
En las ecuaciones anteriores, el subíndice representa la geometría con la que se optimizó la molécula —anión, catión o neutra— y el superíndice se refiere a la carga con la que se obtuvo la energía.

Los principales picos de absorción se simularon con ayuda de cálculos en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo (Runge y Gross, 1984) empleando la misma metodología que en el caso del estado basal (B3LYP/6-311G(d,p)) y considerando 10 estados excitados. La energía de unión del excitón se obtuvo también de los cálculos de estados excitados empleando el software Multiwfn (Lu y Chen, 2012).

RESULTADOS

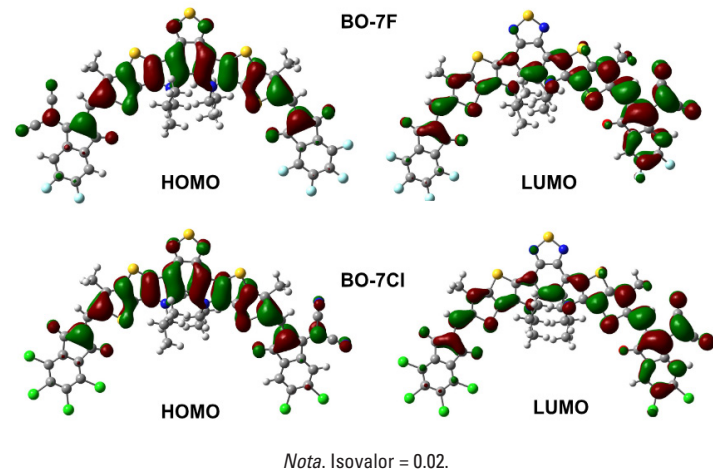
En la Figura 1 se muestran las estructuras de mínima energía, es decir, las geometrías moleculares optimizadas al nivel del teoría B3LYP/6-311G(d,p) para los sistemas BO-7F y BO-7Cl. En ambos casos, las estructuras presentadas se validaron con un cálculo de frecuencias. El mapeo de las superficies de los orbitales moleculares de frontera se puede observar en la Figura 2. Este mapeo indica que, mientras el orbital LUMO se concentra en la parte central ambas moléculas aceptoras, el orbital HOMO se concentra más en las orillas de las dos moléculas aceptoras. Esto podría dar una pista de los posibles sitios de ataque electrofílico y nucleofílico en dichos sistemas.

Figura 1. Estructuras de mínima energía de los aceptores de electrones BO-7F y BO-7Cl.



Nota. Vista frontal (izquierda) y lateral (derecha).

Figura 2. Isosuperficies de los orbitales HOMO y LUMO de BO-7F y BO-7Cl.



La Tabla 1 muestra la energía de los orbitales moleculares de frontera para las dos moléculas bajo estudio. Las posiciones de estos dos orbitales en las moléculas son las siguientes: HOMO (-5.62 eV) y LUMO de BO-7Cl (-3.94 eV) están más abajo que HOMO (-5.60 eV) y LUMO (-3.89 eV) de BO-7F. Igualmente, el valor gap de BO-7Cl (1.68 eV) es más pequeño que en BO-7F, señal de una posible absorción de luz a longitudes de onda más grandes y, en consecuencia, de que la fotogeneración de corriente se vería más favorecida por el espectro solar. La alineación de los orbitales moleculares de frontera es clave para entender el máximo fotovoltaaje — voltaje en circuito abierto— que podría alcanzar la celda solar, pues este viene dado por la ecuación (Scharber y Sariciftci, 2013)

$$(7) \quad V_{OC} \propto |HOMO(D) - LUMO(A)|$$

De tal suerte que el voltaje en circuito abierto es proporcional a la diferencia entre la energía del orbital HOMO del donador y la del orbital LUMO del aceptor. En ese caso, al ser las energías de los orbitales negativas, un valor más negativo beneficia al voltaje en circuito abierto. Esto sucedería con el sistema BO-7Cl en relación a BO-7F si se trabajara con el mismo donador.

Tabla 1. Energía de los orbitales moleculares de frontera (eV) de las moléculas estudiadas.

Molécula	HOMO	LUMO	gap HOMO-LUMO
BO-7F	-5.60	-3.89	1.71
BO-7Cl	-5.62	-3.94	1.68

La Tabla 2 muestra los índices globales de reactividad que se calcularon para ambas moléculas estudiadas. Los parámetros de aceptación de carga, en lo que tenemos un interés especial debido a la naturaleza misma de las moléculas analizadas (A , χ^+ y ω^+) son más grandes para la molécula BO-7Cl, lo que significa que son mejores que su similar BO-7F. Esta observación indica que el sistema con átomos de cloro sería un mejor aceptor de electrones y que tiene una mayor afinidad por el transporte de electrones por su superficie.

Tabla 2. Índices de donación-aceptación de carga (eV) para los aceptores BO-7Cl y BO-7F

Molécula	I	A	χ^-	χ^+	ω^-	ω^+
BO-7Cl	9.47	2.93	7.87	4.57	9.38	3.17
BO-7F	9.43	2.88	7.83	4.53	9.27	3.11

Los datos de los principales picos de absorción aparecen en la Tabla 3, en donde se muestra la longitud de onda más grande a la que absorbe el aceptor de electrones y su equivalente en energía para dicha radiación, llamado energía de absorción, (E_{abs}), así como la fuerza del oscilador o probabilidad de ocurrencia de dicha transición electrónica asociada y los orbitales involucrados. Destaca el desplazamiento hacia el rojo que poseen las longitudes de onda de máxima absorción del compuesto BO-7Cl en comparación con la de su similar BO-7F, por ejemplo, en cloroformo, 677.86 nm y 676.75 nm, respectivamente. Esto se interpreta como un aspecto favorable para el sistema clorado, pues absorciones a mayores longitudes de onda pueden llegar a incrementar la generación de corriente eléctrica durante el efecto fotovoltaico (Ali y Zhao, 2022). En relación al solvente, observamos una tendencia a aumentar la longitud de onda de máxima absorción, es decir, que los ambientes de cloroformo y clorobenceno son más favorables para la fotogeneración que en la fase gaseosa. Además, es

importante destacar que la fuerza del oscilador aumenta para el aceptor BO-7Cl en todos los medios, lo que sugiere que la probabilidad de la transición de HOMO a LUMO es mayor en el sistema clorado.

Finalmente, las energías de reorganización para huecos y electrones, así como la energía de unión del excitón, se muestran en la Tabla 4, en donde resalta el hecho de que las energías de reorganización para electrones (λ) y la energía de unión del excitón (E_b) son más pequeñas para el compuesto clorado que para el fluorado, lo que nos hace pensar que la molécula BO-7Cl es el mejor transportador de electrones entre ambos sistemas, y además, el que menos probabilidad de recombinación tendría en una interfaz hipotética para una celda solar orgánica si se combina con algún donador.

Tabla 3. Datos espectroscópicos de los sistemas BO-5Cl y BO-5F en fase gaseosa, cloroformo y clorobenceno.

Solvente	Molécula	Longitud de onda (nm)	E_{abs} (eV)	f	Transición (orbitales)
Gas	BO-7Cl	674.34	1.839	0.432	HOMO-LUMO (100 %)
Gas	BO-7F	672.41	1.844	0.414	HOMO-LUMO (100 %)
Cloroformo	BO-7Cl	677.86	1.829	0.436	HOMO-LUMO (100 %)
Cloroformo	BO-7F	676.75	1.832	0.418	HOMO-LUMO (100 %)
Clorobenceno	BO-7Cl	678.03	1.829	0.436	HOMO-LUMO (100 %)
Clorobenceno	BO-7F	677.67	1.830	0.419	HOMO-LUMO (100 %)

Tabla 4. Energías de reorganización para huecos y electrones y energía de unión del excitón (eV) en ambos sistemas aceptores.

Molécula	λ	λ_+	λ_{total}	E_b
BO-7F	0.163	0.190	0.353	2.35
BO-7Cl	0.160	0.194	0.354	2.28

CONCLUSIONES

La distribución de los orbitales HOMO y LUMO nos dice cuáles son las regionesceptoras y donadoras de electrones en las moléculas que estamos estudiando, por lo que se podría esperar que la parte de las orillas sería la que acepta carga y la del centro la que la dona. También se concluye de manera general que la molécula BO-7Cl sería mejor aceptora de electrones, tendría un mejor transporte de carga y absorbería más eficientemente la luz que su similar BO-7F debido a sus sobresalientes propiedades electrónicas y espectroscópicas. Además, la energía de unión del excitón también es menor para BO-7Cl, lo que concuerda con los resultados generales del estudio y sugiere que dicho aceptor sería una alternativa promisoría para futuros estudios en el terreno experimental.

REFERENCIAS

- Ali, A. J. y Zhao, L. (2022). *Solar spectral irradiance analysis and modeling: A case study in the black hills area*. North American Power Symposium (NAPS) (1-6). IEEE.
- Allen, T. G., Bullock, J., Yang, X., Javey, A., & De Wolf, S. (2019). Passivating contacts for crystalline silicon solar cells. *Nature Energy*, 4(11), 914-928.
- Cheng, P., y Zhan, X. (2016). Stability of organic solar cells: challenges and strategies. *Chemical Society Reviews*, 45(9), 2544-2582.
- Dai, S. y Zhan, X. (2018). Nonfullerene acceptors for semitransparent organic solar cells. *Advanced Energy Materials*, 8(21), 1800002.
- Dennington, R., Keith, T. A. y Millam, J. M. (2016). *GaussView, version 6.0.16*. Semichem Inc Shawnee Mission KS.
- Dréon, J., Jeangros, Q., Cattin, J., Haschke, J., Antognini, L., Ballif, C. y Boccard, M. (2020). 23.5 %-efficient silicon heterojunction silicon solar cell using molybdenum oxide as hole-selective contact. *Nano Energy*, 70, 104495.
- Fukuda, K., Yu, K. y Someya, T. (2020). The future of flexible organic solar cells. *Advanced Energy Materials*, 10(25), 2000765.
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., ... y Fox, D. J. (2016). *Gaussian 16*. [Software]. Wallingford, CT: Gaussian, Inc.
- Gázquez, J. L., Cedillo, A. y Vela, A. (2007). Electrodonating and electroaccepting powers. *The Journal of Physical Chemistry*, 111(10), 1966-1970.
- Hohenberg, P. Y Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B), B864.
- Hu, Z., Wang, J., Ma, X., Gao, J., Xu, C., Yang, K., ... y Zhang, F. (2020). A critical review on semitransparent organic solar cells. *Nano Energy*, 78, 105376.

- Liu, Y., Li, B., Ma, C. Q., Huang, F., Feng, G., Chen, H., ... y Bo, Z. (2022). Recent progress in organic solar cells (Part I material science). *Science China Chemistry*, 1-45.
- Liu, W., Shi, J., Zhang, L., Han, A., Huang, S., Li, X., ... y Liu, Z. (2022). Light-induced activation of boron doping in hydrogenated amorphous silicon for over 25 % efficiency silicon solar cells. *Nature Energy*, 7(5) 427-437.
- Lu, T., y Chen, F. (2012). Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. *Journal of computational chemistry*, 33(5), 580-592.
- Nelsen, S. F., Chang, H., Wolff, J. J., y Adamus, J. (1993). Polycyclic bis (hydrazine) and bis (hydrazyl) radical cations: high and low inner-sphere reorganization energy organic intervalence compounds. *Journal of the American Chemical Society*, 115(26), 12276-12289.
- Runge, E. y Gross, E. K. (1984). Density-functional theory for time-dependent systems. *Physical review letters*, 52(12), 997.
- Scharber, M. C. y Sariciftci, N. S. (2013). Efficiency of bulk-heterojunction organic solar cells. *Progress in polymer science*, 38(12), 1929-1940.
- Servaites, J. D., Ratner, M. A. y Marks, T. J. (2011). Organic solar cells: A new look at traditional models. *Energy & Environmental Science*, 4(11), 4410-4422.
- Tong, Y., Xiao, Z., Du, X., Zuo, C., Li, Y., Lv, M., ... & Ding, L. (2020). Progress of the key materials for organic solar cells. *Science China Chemistry*, 63, 758-765.

Desarrollo de una aplicación en python para la selección y procesamiento de información arrojada en cálculos de estructura electrónica

RAFAEL BECERRA AGUAYO

rafael.becerra4388@alumnos.udg.mx

ZURIEL NATANAEL CISNEROS GARCÍA

zuriel.cisneros8072@academicos.udg.mx

RESUMEN

En presente trabajo se desarrolló una aplicación en el lenguaje de alto nivel python 3 para la visualización tridimensional de estructuras moleculares. Esta aplicación es capaz de leer archivos de moléculas en el formato estándar xyz, y también, convertir a éste formato los archivos de salida de resultados de *Gaussian 16*; siendo éste último, uno de los paquetes comerciales que más se utilizan en el área de investigación de modelado molecular. Para el desarrollo de la aplicación, se empleó un enfoque de programación orientada a objetos, se crearon clases con sus respectivos métodos para el tratamiento de los átomos, el conjunto de éstos, moléculas; así como los procesos de cálculo de distancias entre átomos e identificación de enlaces en la molécula. De este modo, las clases que se crearon permiten la adición de nuevos métodos para ampliar los usos de esta versión preliminar de la aplicación. En próximas instancias se buscaría agregar métodos de cálculo de parámetros geométricos como la planaridad molecular o la modificación de la estructura.

PALABRAS CLAVE

Programación orientada a objetos (OOP), Desarrollo de software (software development), Software de multiplataforma (cross-platform software), Post-procesamiento de información (data post-processing), Modelado molecular (molecular modeling).

INTRODUCCIÓN

La investigación científica en el área del Modelado Molecular, implica el estudio de diversas propiedades que se asocian a la forma en que los átomos se arreglan para dar lugar a compuestos y materiales. En esta área de investigación, la computación está estrechamente relacionada. Los métodos que derivan de las diferentes ramas de la física, se implementan en paquetes de software. Éstos, emplean algoritmos basados en métodos numéricos para el cálculo de las diferentes propiedades asociadas a una estructura molecular. Por lo general, tras la ejecución de estos paquetes enfocados al cálculo numérico, las salidas son archivos de texto, que van desde el orden de los MB hasta los GB, en consecuencia, es imprescindible el uso de herramientas de post-procesamiento.

Actualmente, existe una gran variedad de software enfocado al post procesamiento en el área del modelado molecular, sin embargo, muchas de estas herramientas suponen el pago de licencias por tiempo determinado y posiblemente no cubran alguna necesidad específica. Si bien, muchas de estas herramientas son software de código abierto, lo más probable es que los usuarios sin conocimientos de programación avanzados puedan realizar alguna modificación, o incluso hacer alguna modificación resulta más complicado que desarrollar un programa en algún lenguaje de alto nivel.

Aunque las necesidades de procesado y selección de información, dentro del área del modelado molecular, pueden ser enormemente variadas, algo que continúa siendo esencial, es el acceso a software para la visualización de las estructuras tridimensionales de moléculas y materiales. De este modo, el objetivo del proyecto es desarrollar una solución de software que permita visualizar estructuras moleculares en 3D de manera accesible y flexible, que dé solución a las necesidades específicas de los proyectos que actualmente se realizan en el Laboratorio de Modelado Molecular y Materiales del Centro Universitario de los Lagos, y que, sin duda, son necesidades en común de toda esta área de investigación.

En el presente proyecto se creó un programa que puede utilizarse en un entorno de desarrollo integrado (IDE) o desde el intérprete de órdenes Bash. El software debe ser capaz de manejar archivos de coordenadas de moléculas en el formato .xyz; típicamente usado por otros paquetes de software, o convertir automáticamente archivos de salida de *Gaussian 16* a

.xyz. Además, debe ser capaz de identificar y representar enlaces covalentes entre átomos.

MATERIALES Y MÉTODOS

Debido a su versatilidad y las numerosas bibliotecas científicas, el lenguaje de programación elegido para este proyecto fue Python 3. A continuación, se describen las principales bibliotecas utilizadas:

- *NumPy*. Se utiliza para la manipulación eficiente de datos numéricos. En este proyecto, se emplea para crear y gestionar matrices que contienen las coordenadas de los átomos de la molécula. La eficiencia de NumPy es crucial para el cálculo de distancias y otros análisis (NUMPY, 2023).
- *Matplotlib*. Se utiliza para crear visualizaciones en 3D de las moléculas. Permite representar los átomos y los enlaces, en una representación tridimensional dinámica. Esto facilita la comprensión de la estructura de la molécula (Hunter et al., 2023).
- *Scikit-Learn (sklearn)*. Aunque Scikit-Learn es comúnmente utilizado para aprendizaje automático, en este proyecto se emplea para cálculos relacionados con distancias y análisis de datos. Esto incluye la identificación de enlaces covalentes y la búsqueda de patrones en los datos de las moléculas (du Boisberranger et al., 2023).
- *Os*. La biblioteca os se utiliza para tareas relacionadas con el sistema operativo, como la manipulación de archivos. En particular, se utiliza para determinar la extensión de los archivos de entrada y para gestionar la conversión de archivos .log a .xyz (Python Software Foundation, 2023).

El primer paso en el procesamiento de las moléculas es la lectura del archivo de entrada. Si el archivo tiene una extensión .log —archivo de salida de *Gaussian*—, se realiza una conversión al formato estándar .xyz; para asegurarse de que todas las entradas se manejen de la misma manera. Esta conversión es esencial para garantizar la uniformidad en el análisis.

El cálculo de distancias entre átomos es fundamental para identificar los enlaces covalentes en una molécula. Para ello se utilizó álgebra vectorial, se determinó la distancia entre cada par de átomos en la matriz

de coordenadas. Estas distancias, se utilizan para analizar la estructura de la molécula y determinar si dos átomos están unidos por un enlace covalente. Para ésto, se identificaron los enlaces comparando las distancias calculadas, con una base de datos de distancias típicas de enlaces covalentes simples. Si la distancia entre dos átomos, se encuentra dentro de un rango específico y los átomos son de los tipos adecuados, se considera que existe un enlace covalente entre ellos. Esta identificación es un paso crucial en el análisis de la estructura de la molécula.

Finalmente, para la visualización tridimensional de la molécula, utilizando la biblioteca Matplotlib, se representan los enlaces covalentes detectados en color verde, lo que facilita la visualización de la estructura, a los átomos se les asignaron colores específicos según su tipo, lo que permite también una identificación rápida.

RESULTADOS

En este código, se ha aplicado la Programación Orientada a Objetos (POO) para crear una estructura de software que facilita la representación y el análisis de estructuras moleculares en 3D. La POO es un enfoque que se basa en la creación de “objetos” que contienen tanto datos —atributos—, como un comportamiento —métodos— relacionado. Esto es particularmente útil en aplicaciones científicas y de análisis de datos, ya que permite modelar entidades del mundo real de manera coherente y modular.

CLASE ATOM

La primera clase que se creó se nombró ‘Atom’, el código de ésta se muestra en la Tabla 1. Esta clase se encarga de representar individualmente cada átomo en una molécula. Un objeto ‘Atom’ almacena información crucial, como el tipo de átomo —por ejemplo, “H” para hidrógeno, “C” para carbono— y sus coordenadas tridimensionales (x, y, z). Esto es esencial para analizar la distancia entre átomos y asignar los colores para la visualización en 3D. La programación orientada a objetos nos permite encapsular estos datos y comportamientos en un solo objeto, lo que simplifica la manipulación de los átomos.

Tabla 1. Código de python 3 de la clase ‘Atom’, esta consiste de las coordenadas del átomo así como su color representativo.

Clase ‘Atom’
<pre>class Atom: def __init__(self, element, x, y, z): self.x = x self.y = y self.z = z self.element = element def distance_atom(self, Atom): distance = sqrt(pow((self.x - Atom.x), 2) + pow((self.y - Atom.y), 2) + pow((self.z - Atom.z), 2)) return distance def set_color(self): value_color = COLOR_ATOMS if self.element in value_color: return value_color[self.element]</pre>

CLASE MOLECULE

La segunda clase que se desarrolló fue ‘Molecule’ (ver Tabla 2). Esta clase representa una molécula en su conjunto. Cuando se instancia esta clase con un archivo ‘.xyz’, se procesa el archivo para extraer las coordenadas de los átomos y se crean instancias de la clase ‘Atom’ para cada uno de ellos. Aquí es donde POO brilla: podemos agrupar todos los átomos y operaciones relacionadas con la molécula en una estructura cohesiva. Esto facilita enormemente la manipulación de las moléculas y el análisis de sus propiedades.

Tabla 2. Código de python 3 de la clase ‘Molecule’, esta consiste en calcular y graficar los átomos así como sus enlaces.

Clase ‘Molecule’
<pre>class Molecule: def __init__(self, file): self.xyz = open_file(file) self.atoms = [] self.set_arrays()</pre>

Continúa sg. pg.

```

def set_arrays(self):
    self.xyz.pop(0)
    self.xyz.pop(0)

    for i in range(len(self.xyz)):
        coordinate = self.xyz[i].split()
        self.atoms.append(Atom(coordinate[0],
                                float(coordinate[1]),
                                float(coordinate[2]),
                                float(coordinate[3])))

    def calculate_links(self):
        atoms_links = set()

    def set_atoms(head, tail, a1, a2):
        if ((head > distance > tail) and
            (self.atoms[i].element == a1 and self.atoms[j].element == a2)):
            link = "{}-{}".format(i, j)
            if (link not in atoms_links) and (link[::-1] not in atoms_links):
                atoms_links.add(link)

    for i in range(len(self.xyz)):

    for j in range(len(self.xyz)):

        distance = self.atoms[i].distance_atom(self.atoms[j])

    set_atoms(1.54, 1.2, "C", "C")
    set_atoms(1.12, 1.06, "C", "H")
    set_atoms(2, 1, "C", "N")
    set_atoms(1.8, 1.7, "C", "Cl")
    set_atoms(1.8, 1.7, "C", "S")
    set_atoms(1.6, 1.2, "C", "O")
    set_atoms(1.5, 1.2, "N", "N")
    set_atoms(1.5, 1.2, "C", "F")
    set_atoms(1.9, 1.7, "C", "Br")

    return atoms_links

    def graph(self):

    fig = plt.figure(figsize=(8, 8))
    ax = Axes3D(fig)
    ax.set_facecolor('#000000')

    atoms_links = self.calculate_links()

```

Continúa sg. pg.

```

for i in range(len(self.atoms)):
    for j in range(len(self.atoms)):
        link = "{}-{}".format(i, j)
        x = [self.atoms[i].x, self.atoms[j].x]
        y = [self.atoms[i].y, self.atoms[j].y]
        z = [self.atoms[i].z, self.atoms[j].z]

    if link in atoms_links:
        ax.plot3D(x, y, z, color="g")

# Atoms graphic
for k in range(len(self.atoms)):
    ax.scatter(self.atoms[k].x, self.atoms[k].y, self.atoms[k].z, color=self.atoms[k].set_color(), s=50)
plt.axis("off")
plt.show()

```

La principal ventaja de la programación orientada a objetos en este contexto, es que cada átomo (un objeto `Atom`) es capaz de realizar cálculos específicos relacionados con su distancia con otros átomos y su color, para ellos se leen un conjunto de datos precargados como un diccionario de python (ver Tabla 3). Por ejemplo, podemos calcular la distancia entre dos átomos mediante métodos dentro de la clase `Atom`. Esto permite un análisis detallado de las propiedades de la molécula en función de la interacción entre sus átomos. Además de poder reutilizar los métodos que utilizan las clases para manipular los archivos y los diccionarios que contienen los datos de los átomos.

Tabla 3. Diccionario con información sobre los átomos respecto a su número atómico y su color representativo junto con el método para abrir los archivos log y xyz.

```

COLOR_ATOMS = {"H": "#FFFFFF", "C": "#909090", "N": "#3050F8", "O": "#FF0D0D", "F": "#90E050",
               "Cl": "#1FF01F", "Br": "#A62929", "I": "#940094", "S": "#FFFF30"}

```

```

elements = {
1: 'H', 2: 'He', 3: 'Li', 4: 'Be', 5: 'B',
6: 'C', 7: 'N', 8: 'O', 9: 'F', 10: 'Ne',
11: 'Na', 12: 'Mg', 13: 'Al', 14: 'Si', 15: 'P',
16: 'S', 17: 'Cl', 18: 'Ar', 19: 'K', 20: 'Ca',
21: 'Sc', 22: 'Ti', 23: 'V', 24: 'Cr', 25: 'Mn',
26: 'Fe', 27: 'Co', 28: 'Ni', 29: 'Cu', 30: 'Zn',
31: 'Ga', 32: 'Ge', 33: 'As', 34: 'Se', 35: 'Br',
36: 'Kr', 37: 'Rb', 38: 'Sr', 39: 'Y', 40: 'Zr',
41: 'Nb', 42: 'Mo', 43: 'Tc', 44: 'Ru', 45: 'Rh',

```

Continuar s.pg.

```

46: 'Pd', 47: 'Ag', 48: 'Cd', 49: 'In', 50: 'Sn',
51: 'Sb', 52: 'Te', 53: 'I', 54: 'Xe', 55: 'Cs',
56: 'Ba', 57: 'La', 58: 'Ce', 59: 'Pr', 60: 'Nd',
61: 'Pm', 62: 'Sm', 63: 'Eu', 64: 'Gd', 65: 'Tb',
66: 'Dy', 67: 'Ho', 68: 'Er', 69: 'Tm', 70: 'Yb',
71: 'Lu', 72: 'Hf', 73: 'Ta', 74: 'W', 75: 'Re',
76: 'Os', 77: 'Ir', 78: 'Pt', 79: 'Au', 80: 'Hg',
81: 'Tl', 82: 'Pb', 83: 'Bi', 84: 'Po', 85: 'At',
86: 'Rn', 87: 'Fr', 88: 'Ra', 89: 'Ac', 90: 'Th',
91: 'Pa', 92: 'U', 93: 'Np', 94: 'Pu', 95: 'Am',
96: 'Cm', 97: 'Bk', 98: 'Cf', 99: 'Es', 100: 'Fm',
101: 'Md', 102: 'No', 103: 'Lr', 104: 'Rf', 105: 'Db',
106: 'Sg', 107: 'Bh', 108: 'Hs', 109: 'Mt', 110: 'Ds',
111: 'Rg', 112: 'Cn', 113: 'Uut', 114: 'Fl', 115: 'Uup',
116: 'Lv', 117: 'Uus', 118: 'Uuo'}

def open_file(file):
    f = open(file, 'r')
    data = f.readlines()
    f.close()
    return data

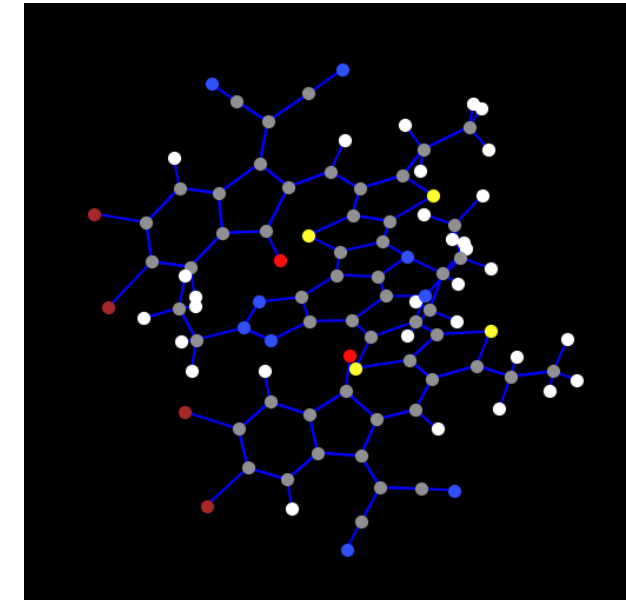
```

Además, las instancias de la clase `Molecule` pueden realizar análisis a nivel de molécula, como la identificación de enlaces covalentes. Esto es posible gracias a la modularidad y encapsulación que ofrece la POO. Cada entidad (átomos y moléculas) se modela de manera independiente, lo que simplifica el análisis y la manipulación.

Otra ventaja clave de la programación orientada a objetos es que hace que el código sea más modular y reutilizable. Podemos trabajar con múltiples moléculas simplemente creando instancias adicionales de la clase `Molecule`. Esto es especialmente útil para futuras expansiones y automatización en el análisis de estructuras moleculares.

En la siguiente Figura 1 se muestra el resultado de la implementación del software, los enlaces de la molécula se representan en color azul, a los distintos tipos de átomos se les asignan colores muy parecidos a los colores que tradicionalmente se asignan a cada átomo en otras alternativas como jmol o GaussView.

Figura 1. Captura de la representación tridimensional de una molécula de acuerdo a la ejecución del software desarrollado.



En resumen, la Programación Orientada a Objetos en este código beneficia la organización, la encapsulación y la modularidad. Cada átomo y molécula se representan como objetos independientes con sus propios atributos y métodos, lo que simplifica el análisis y la visualización de estructuras moleculares. Además, permite una fácil expansión y reutilización del software en proyectos futuros.

CONCLUSIONES

El proyecto de investigación descrito se centra en la utilización de frameworks y bibliotecas de programación, como NumPy, Matplotlib y Scikit-Learn, para optimizar y automatizar el análisis de estructuras moleculares en un Laboratorio de Modelado Molecular, al mismo tiempo que explora la implementación de técnicas de POO. Este proyecto destaca la eficacia de los frameworks utilizados, así como su potencial para futuro desarrollo, por ejemplo, la creación de una interfaz gráfica amigable para el usuario, la integración de inteligencia artificial para la detección

automática de enlaces y la optimización del rendimiento del software, permitiendo el análisis de moléculas más grandes y complejas sin sacrificar velocidad. La interdisciplinariedad y escalabilidad del proyecto son rasgos destacados, ya que combina conocimientos de diversas áreas científicas y ofrece margen para un desarrollo continuo. En resumen, este proyecto sienta las bases para el desarrollo de una herramienta accesible y fácil de usar para investigadores en el área de modelado molecular con un amplio potencial de desarrollo y mejora en el futuro.

REFERENCIAS

- Du Boisberranger, J., Van den Bossche, J., Loïc, E. y J. Fan, T. (2023). *scikit-learn*. <https://scikit-learn.org/stable/>
- Hunter, J., Dale, D. y Firing, E. (s.f.). *Matplotlib*. <https://matplotlib.org/stable/>
- Matplotlib documentation. (s.f.). *Matplotlib 3.8.4 documentation*. <https://matplotlib.org/stable/>
- NUMPY. (16 de septiembre de 2023). <https://numpy.org/>
- Python Software Foundation. (6 de octubre de 2023). *OS. Interfaces misceláneas del sistema operativo*. <https://docs.python.org/es/3.10/library/os.html>
- Scikit-learn: machine learning in Python. (s.f.). *scikit-learn 1.4.2 documentation*. <https://scikit-learn.org/stable/>

Equipos y prácticas de laboratorio didácticos para física e ingeniería

MARÍA FERNANDA VALADEZ SÁNCHEZ
 maria.valadez4730@alumnos.udg.mx

MARÍA DEL RAYO ANGELES APARICIO FERNÁNDEZ
 delrayoangel.aparicio@academicos.udg.mx

RESUMEN

El trabajo experimental juega un papel determinante en la formación de los alumnos de las carreras de ciencias e ingeniería. Las sesiones de laboratorio les dan perspectiva sobre: las posibles aplicaciones de la teoría (por ejemplo, la factibilidad de un proyecto tecnológico), la explicación de fenómenos naturales y la veracidad de la información circulante en los medios de comunicación, en lo que se refiere a temas científicos. Con frecuencia ocurre que en los programas educativos de las carreras de ciencias e ingeniería faltan cursos de laboratorio de física, por ello, los profesores que imparten las materias de física buscan alternativas para que los alumnos experimenten con fenómenos reales. Para contribuir a la disminución de esta problemática, se propuso llevar a cabo una estancia de investigación en la que se fabricaran varios dispositivos, con material de fácil acceso, para la demostración y estudio de fenómenos de tres áreas de la física, “electromagnetismo”, “óptica” y “ondas y oscilaciones”. También se planeó utilizar equipo formal de laboratorio para hacer demostraciones relativas a los temas a tratar y con ello complementar el trabajo.

PALABRAS CLAVE

Dispositivos para enseñanza de las ciencias (built devices for science), Experimentos de ciencia básica (basic science experiments), Experimentos de física sencillos (simple physics experiments), Leyes de la reflexión y refracción de la luz (Laws of reflection and refraction of light), Medición de la constante de gravedad (measurement of gravity constant).

INTRODUCCIÓN

Muchas veces los profesores de nivel universitario dan por hecho que todos los alumnos hicieron, en algún momento de su vida escolar, algunos dispositivos básicos para el estudio de las ciencias naturales, sin embargo, esto no siempre ocurre. La enseñanza en nuestro país es tan heterogénea que incluso los dispositivos más sencillos no fueron fabricados por los alumnos en ninguna de sus etapas educativas. Basándose en esta realidad y conscientes de la aportación que da el trabajo experimental a los alumnos de ciencias e ingeniería, se planeó que el trabajo para la estancia de investigación consistiera en fabricar cinco dispositivos con material de fácil acceso, para la demostración y estudio de seis fenómenos abordados en los cursos de física de las ingenierías del CULagos. Aquí cabe aclarar que “material de fácil acceso” significa materiales de bajo costo que puede conseguirse en supermercados o ferreterías. También se decidió utilizar equipo formal de laboratorio para complementar el trabajo.

Se eligieron tres áreas de la física: electromagnetismo, óptica y oscilaciones y ondas. Para electromagnetismo se construyeron tres dispositivos: la brújula, una montura para reproducir el experimento de Oersted y un electroimán. Además, se hizo una demostración de la Ley de Inducción de Faraday usando un juego de bobinas, que es parte del equipo formal de laboratorio de física. En la parte de óptica se trabajaron los temas reflexión y refracción de la luz, para lo cual se construyó un dispositivo y se utilizó un láser de baja potencia. También se explicó cómo funcionan el microscopio y el telescopio, usando para ello instrumentos formales de laboratorio (un microscopio óptico compuesto y un telescopio newtoniano). Y en cuanto a las ondas y oscilaciones se construyó un péndulo simple y con él se midió la aceleración de la gravedad.

A primera vista puede parecer que los temas elegidos son totalmente independientes, sin embargo, es todo lo contrario. El electromagnetismo estudia las ondas electromagnéticas y la luz —que es estudiada por la óptica— son ondas electromagnéticas. Las oscilaciones son parte de la naturaleza de cualquier tipo de onda, por ello los temas abordados en el trabajo están íntimamente relacionados entre sí y con este criterio se eligieron el número de experimentos y el orden de los mismos.

Los dispositivos construidos, en su mayoría, sirvieron para realizar experimentos cualitativos, sin embargo también hubo experimentos

cuantitativos como el de las leyes de reflexión y refracción y el péndulo simple. Estos dispositivos construidos no son de larga duración porque el material utilizado en su fabricación es frágil, pero todo el trabajo de la estancia quedó documentado y el archivo está para quien quiera reproducir el trabajo en algún curso o taller.

MATERIALES Y MÉTODOS

Los materiales utilizados están enlistados en las tablas siguientes, así como la descripción de la fabricación de los dispositivos; sus fotografías se encuentran a continuación de la Tabla 6. En cada tabla se agregó una columna de comentarios que incluye consejos o posibles contratiempos que se presentan a la hora de probar los dispositivos.

Para la parte de electromagnetismo se construyeron tres dispositivos: la brújula, una montura para reproducir el experimento de Oersted y el electroimán. La brújula es un dispositivo que ya era usado por los chinos en el siglo II de nuestra era; este es un instrumento (Figura 1) que funciona gracias al campo magnético de la Tierra; fue utilizado en el año de 1820 por Hans Christian Oersted quien, acercando una brújula a un cable que conducía corriente eléctrica, descubrió que las corrientes eléctricas generan campos magnéticos, lo cual demostró la relación entre la electricidad y el magnetismo. Por otra parte, también se utilizó un juego de bobinas del laboratorio de física para una demostración de la Ley de inducción de Faraday, la cual explica cómo los campos magnéticos pueden generar corrientes eléctricas.

Tabla 1. La brújula.

<i>Material</i>	<i>Fabricación</i>	<i>Comentarios</i>
<ul style="list-style-type: none"> • Placa de unícel de 7 mm de espesor y de 10 X 10 cm. • Una aguja de costura. • Un imán de neodimio0 • Un depósito o plato hondo pequeño. • Agua para llenar el depósito. • Cuter o navaja. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Recortar un disco de unícel de 2 cm de diámetro. 2. Frotar la aguja contra el imán, aproximadamente diez veces. 3. Atravesar el disco de unícel con la aguja a lo largo del diámetro y centrada en cuanto al espesor. 4. Colocar el disco de unícel en el depósito con agua. 	<p>Si la aguja quedó bien imantada y está centrada en el disco de unícel, cuando se coloque en el depósito con agua debe orientarse en la dirección Norte-Sur geográfico, de la Tierra.</p> <p>La aguja podría señalar una orientación distinta a la Norte-Sur si se encuentra cerca de algún aparato que tenga algún campo magnético, como son las bocinas.</p>

Tabla 2. Montura para reproducir el experimento de Oersted.

Material	Fabricación	Comentarios
<ul style="list-style-type: none"> • Cartón o papel caple. • Silicón frío. • Un alambre de cobre de longitud 20 cm, calibre 10. • Dos caimanes. • Cuatro pilas tipo D. • Una brújula. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Recortar un rectángulo de papel caple de 15 cm X 7 cm para la base de la montura. 2. Recortar dos rectángulos de papel caple de 3 cm de ancho por 12 de largo (estos serán los soportes para el alambre en la montura). Doblar los rectángulos por la mitad y hacer un pequeño corte triangular en el centro del doblez (sobre estos cortes descansará el alambre de cobre horizontalmente sin moverse, como lo muestra la Figura 2). 3. Doblar un centímetro de cada extremo de los rectángulos, en sentidos opuestos (estos dobleces servirán para pegar los soportes a la base). 4. Fijar los soportes rectangulares a la base con silicón frío. 5. Colocar el alambre sobre el corte central de los soportes y conectar sus extremos, mediante los caimanes, a las cuatro pilas dispuestas en serie. 	<p>El alambre debe orientarse en la dirección Norte-Sur geográfico de la Tierra, al igual que la aguja de la brújula; esta deberá descansar debajo del alambre, a una distancia aproximada de un centímetro, para lo cual puede colocarse sobre un trozo de madera o unicel (esto no se presenta en la figura).</p> <p>Al conectar los extremos del alambre a las pilas, la corriente eléctrica que pasa por el alambre crea un campo magnético alrededor del mismo, ese campo cambia la dirección de la aguja de la brújula.</p>

Tabla 3. El electroimán.

Material	Fabricación	Comentarios
<ul style="list-style-type: none"> • Diez metros de alambre de cobre • Esmaltado, calibre 18. • Un tornillo galvanizado de 2.5 pulgadas de largo. • Una pila tipo D. • Cinta aislante. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Se empieza a enrollar el alambre de cobre sobre el tornillo galvanizado, dejando 10 cm de alambre libre antes de empezar el devanado. El alambre puede quedar enrollado en 3 o 4 capas y al final también deben dejarse 10 cm sin devanar (Figura 3). 2. Se elimina el esmalte de los extremos del alambre y se conectan a la pila. 	<p>Los extremos del alambre se fijan con cinta aislante para que el devanado de alambre se mantenga. Al cerrar el circuito, el embobinado de alambre se comporta como un imán que podrá atraer objetos pequeños demetales ferromagnéticos como clips, clavos o grapas. Al desconectar la pila desaparece el campo magnético que creó la corriente eléctrica.</p>

Tabla 4. Ley de inducción de Faraday.

Material	Procedimiento	Comentarios	
<ul style="list-style-type: none"> • Juego de bobinas. • Dos imanes de neodimio en forma de barra de distintas intensidades. • Dos LEDs rojos. • Dos caimanes. 	1. Se conecta uno de los LEDs, mediante los caimanes a los extremos de la bobina de mayor número de vueltas.	Las bobinas utilizadas tienen las siguientes características	
	2. Al mover uno de los imanes a través de la bobina el LED se encenderá mientras dure el movimiento.	No. de vueltas	Diámetro de alambre (mm)
	3. El procedimiento se repite con cada bobina para comparar la intensidad de la luz del LED en cada caso.	200	0.9
		400	0.65
	800	0.45	
	1600	0.33	
	3200	0.22	

En la parte de Óptica se fabricó un dispositivo con el cual se comprobaron las leyes de reflexión y refracción de la luz (Sears, 2014) de forma cuantitativa. El dispositivo consistió de un pequeño soporte en forma de mesa horizontal, sobre el cual se colocaron un semi-círculo y un bloque cuadrado de vidrio, uno a la vez, para observar y medir los ángulos de incidencia, ángulos de reflexión y ángulos de refracción de la luz de un haz de láser que incidía sobre una de sus caras (ver Figura 5). Por otro lado, la demostración del funcionamiento del microscopio y el telescopio se hizo utilizando dos instrumentos formales de laboratorio. Se explicó a los alumnos cómo forman las imágenes los telescopios y los microscopios y se hizo una sesión de observación para cada instrumento.

Tabla 5. Leyes de reflexión y refracción de la luz.

Material	Fabricación	Comentarios
<ul style="list-style-type: none"> • Laser de He-Ne de 12 mW. • Semi-círculo y bloque cuadrado de vidrio, ambos de ½ pulgada de espesor. • Tabla cuadrada de MDF de 24 cm X 34 cm y 5 mm de espesor. • Vástago de metal. • Tornillo. • Soporte para el vástago de metal. • Hoja de papel blanco. • Transportador. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. La tabla de MDF se fija, mediante el tornillo, al vástago y este se coloca en el soporte para tener una pequeña mesa horizontal. 2. Sobre la hoja blanca se dibujan dos juegos de líneas perpendiculares entre sí, una horizontal (para alinear las orillas rectas del semi-círculo y el bloque cuadrado de vidrio) y la otra línea representa la línea normal (N) desde la cual se miden, con el transportador, los ángulos de incidencia, reflexión y refracción de la luz de laser que se hace incidir sobre las orillas rectas. 	<p>El experimento se realiza en un ambiente oscuro. Se hacen mediciones de los ángulos de incidencia, reflexión y refracción del haz de laser y se comprueban las leyes de reflexión y refracción de la luz.</p>

Para el tema “Ondas y oscilaciones” se armó un péndulo simple, utilizando un objeto (pesa) atado al extremo de una cuerda inextensible (ver Figura 6). A su vez, la cuerda se colgó, por su otro extremo, a un soporte universal. Se variaron los parámetros del péndulo (longitud de la cuerda y masa del objeto) para investigar si el periodo de oscilación del péndulo (T) dependía de alguno de estos parámetros. Se midió el periodo de oscilación del péndulo con una longitud del hilo, para las tres pesas. Se varió la longitud del hilo y nuevamente se midió el periodo del péndulo, para las tres pesas, para observar los efectos que esto tenía. La expresión para calcular el periodo involucra el valor de la aceleración de la gravedad (g), del lugar donde se lleva a cabo el experimento, y la longitud de la cuerda (L), esto es (Serway, 2008). La masa del cuerpo no aparece en la fórmula porque T no depende de ella.

Tabla 6. Péndulo simple.

Material	Fabricación	Comentarios
<ul style="list-style-type: none"> Un soporte universal. Tres pesas de 50 gr, 100 gr y 200 gr. Un metro de hilo de algodón inextensible, que soporte el peso de las pesas sin romperse. 	Se fijó una de las pesas a un extremo del hilo y el otro extremo se ató a una varilla horizontal fija al soporte universal, de tal forma que la pesa pudiera oscilar libremente cuando se le sacara de su posición de equilibrio (dirección vertical del hilo), con desviaciones de ángulos menores.	Con los experimentos pudo comprobarse que, efectivamente, el periodo no depende de la masa del objeto. Por otra parte, el cálculo de la aceleración de la gravedad se obtuvo despejando este parámetro de la ecuación para el de diez grados.

Figura 1. La brújula.



Figura 2. Montura para el experimento de Oersted.

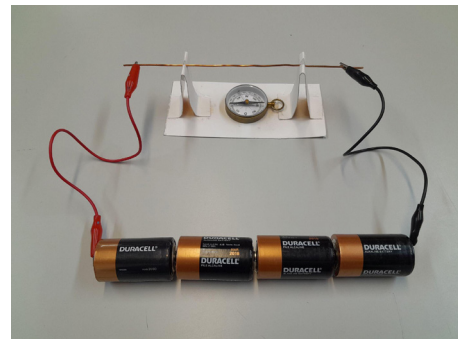
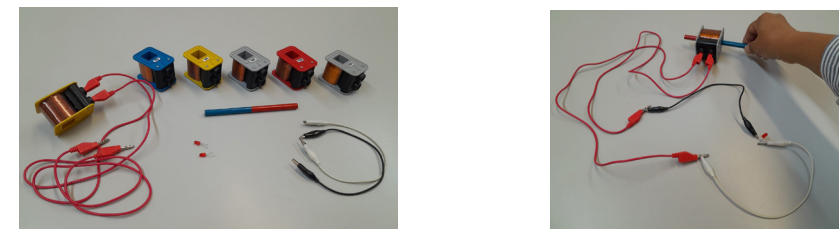


Figura 3. El electroimán.



Nota. A la izquierda el material; a la derecha el montaje.

Figura 4. Material y montaje para el experimento de Ley de inducción de Faraday.



Nota. A la izquierda el material; a la derecha el montaje.

Figura 5. Experimento de Leyes de reflexión y refracción.

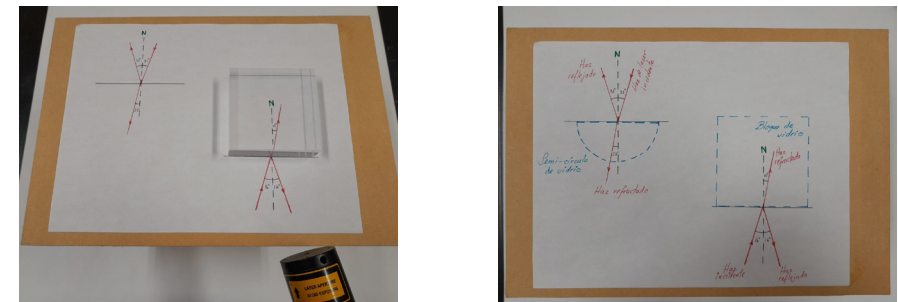


Figura 6. Péndulo simple.



RESULTADOS

Durante la estancia de investigación se construyeron todos los dispositivos planeados desde el inicio de la misma. Los alumnos participantes pudieron comprobar que los fenómenos reales concuerdan con la descripción que hacen de ellos los libros de texto.

La fabricación de la brújula sirvió de preámbulo para la construcción de la montura para el experimento de Oersted y el electroimán es resultado del campo magnético alrededor del alambre con corriente eléctrica, que Oersted descubrió.

En lo relativo a la parte de óptica, la medición de los ángulos de incidencia, refracción y reflexión del haz de láser utilizado, permitió comprobar las leyes de la reflexión y refracción de la luz, que son la base para entender la formación de imágenes en todo tipo de instrumentos ópticos, en particular el microscopio y el telescopio.

Finalmente, la medición del periodo de oscilación de los tres objetos utilizados en el péndulo simple, hizo posible el cálculo de la constante de la gravedad, lo que demostró a los estudiantes que esta medición no es un proceso complejo y que el péndulo tiene aplicaciones prácticas.

El trabajo realizado durante la estancia de investigación, puede servir para complementar las actividades que se hacen durante los cursos de

física, correspondientes a los temas tratados, en lo relativo a la demostración de los fenómenos físicos en la vida real.

CONCLUSIONES

Cada uno de los temas abordados durante la estancia de investigación juega un papel importante en la formación de un ingeniero. Con los dispositivos fabricados se estudiaron varios fenómenos físicos marcados en los programas educativos de las materias de física. Se experimentó con ellos variando algunos parámetros para observar las implicaciones que esto conlleva. En todos los casos se reprodujeron los fenómenos deseados y se comprobó que las leyes de la física se verifican en el fenómeno real.

El trabajo realizado con los dispositivos complementa los conocimientos que adquieren los estudiantes que los utilizan, ya que con frecuencia surgen nuevas ideas al estar usándolos. El equipo formal de laboratorio generalmente se adquiere con instructivos de uso que predisponen al usuario para que realice los experimentos de la forma indicada. Los dispositivos de materiales de fácil acceso estimulan al usuario para que efectúe variantes en los montajes o la forma de tomar las mediciones durante el experimento. Por otra parte, armar estos dispositivos son el resultado del ingenio de quienes los fabrican, por lo cual los fabricantes adquieren otra perspectiva sobre la experimentación.

La fabricación de estos dispositivos queda documentada para que la experiencia pueda reproducirse por profesores o alumnos interesados en ello. También es una base para continuar con la construcción de otros aparatos que apoyen la enseñanza de la física en el CULagos.

REFERENCIAS

- Cienciabit: Ciencia y Tecnología. (1 de septiembre de 2014). Inducción electromagnética. EXPERIMENTOS. [Archivo de video]. Youtube. https://www.youtube.com/watch?v=QjKy_myFHx4
- Halliday, D. y Resnik, R. (2006). Física. *Patria* 5 (2)
- Manuel Rodríguez-Achach. (28 de febrero de 2016). *El Experimento de Oersted*. [Archivo de video]. Youtube. <https://www.youtube.com/watch?v=Mwfl7BKgQLk>
- Sears, F.(2014). Física Universitaria. *Pearson* 13 (2)
- Serway, R. y Jewett J. (2008). Física para ciencias e ingeniería. *Cengage Learning* 7 (1)
- Serway, R. (2015). Física para ciencias e ingeniería. *Learning Editores* 9 (2)

Interacción ligando-proteína por Molecular Docking: Mecanismo de acción de diversos inhibidores sobre la estructura de la tirosinasa de manzana latente (MdPPO1)

VALERIA SILVA VILLALOBOS

valeria.silva7165@alumnos.udg.mx;

ZURIEL NATANAEL CISNEROS GARCÍA

zuriel.cisneros8072@academicos.udg.mx;

RESUMEN

En el presente trabajo, se evaluó a través de métodos *in silico*, la afinidad de acoplamiento entre la tirosinasa de manzana latente MdPPO₁ y los ligandos glutatión, ácido ascórbico, ácido cítrico y L-cisteína; compuestos considerados inhibidores de este tipo de enzimas. Se implementó un modelo sistemático, que combina métodos de estructura electrónica para tener mayor certeza de la geometría molecular de los posibles inhibidores, y métodos de *molecular docking* para realizar los acoplamientos ligando-proteína. De acuerdo a los resultados obtenidos, se podría establecer como el posible mejor inhibidor el glutatión, y en orden descendente le seguirán el ácido cítrico, ácido ascórbico y la L-cisteína. Las interacciones entre estos compuestos y la MdPPO₁ están sobre un *pocket* de gran capacidad para establecer puentes de hidrógeno, siendo esta la interacción de mayor presencia de todos los complejos obtenidos. Sin embargo, en el caso del glutatión, las de interacciones carga-carga que se establecen entre el ligando y los residuos ASP 178, ASP 186 y GLU 185, así como la ausencia de interacciones no favorables, explica el mejor acoplamiento de éste compuesto en relación al resto.

PALABRAS CLAVE

Pardeamiento enzimático (enzymatic browning), Polifenol oxidasa (polyphenoloxidase), Docking molecular (molecular docking), Sitios de

inhibición (binding sites), Cómputo de alto rendimiento (high performance computing).

INTRODUCCIÓN

Si consideramos cualquier proceso biológico a escala de átomos y moléculas, éstos tienen como principio esencial la interacción entre macromoléculas y moléculas pequeñas o átomos. Ejemplos de ello son el transporte de oxígeno, la activación de receptores en la membrana celular, unión antígeno-anticuerpo o los receptores de neurotransmisores. En cada uno de estos mecanismos, interactúan moléculas relativamente pequeñas, o átomos, con un receptor, lo que a su vez, desencadena otros procesos que dan lugar a la regulación biológica o metabolismo de nutrientes. Un ejemplo de la importancia de la interacción entre macromoléculas y moléculas pequeñas, que incluso es de importancia industrial, es la inhibición de las enzimas polifenol oxidasa.

Las polifenol oxidasas (PPOs) son enzimas ubicuas que contienen Cu y catalizan el pardeamiento enzimático en frutas y vegetales. Este fenómeno es consecuencia del estrés tanto mecánico como físico que se produce durante el crecimiento, almacenamiento y procesamiento post-cosecha de los alimentos (Tinello *et al.*, 2018). Los sustratos polifenólicos son catalizados y oxidados por esta enzima en quinonas, que son después polimerizadas por aminoácidos, proteínas, u otras quinonas en pigmentos marrones mediante reacciones no enzimáticas. Estas reacciones conducen a la pérdida de calidad, y provocan cambios indeseables en las propiedades organolépticas de frutos y vegetales; además suele ir asociado al desprendimiento de olores, y provoca cierto detrimento del valor nutricional de los mismos.

Desde hace varios años, encontrar métodos para inhibir o retrasar la aparición del pardeamiento enzimático ha sido uno de los principales objetivos dentro de la industria alimentaria. Existen diversos agentes químicos antipardeantes que funcionan como inhibidores de PPO, los cuales se suelen dividir en cuatro grupos según su mecanismo de acción: agentes reductores —inhiben indirectamente la PPO reduciendo las o-quinonas a difenoles incoloros—, acidulantes —son inactivadores de enzimas no específicos, reducen el pH por debajo del valor óptimo para PPO—, quelantes —inactivan la PPO atrapando el ion cobre en el sitio activo

de la enzima— y acomplejantes —su núcleo hidrofóbico puede formar complejos con varias moléculas, incluidos sustratos fenólicos, evitando así su oxidación a quinonas y la consiguiente formación de pigmentos marrones— (Lante *et al.*, 2010).

Estudios recientes se han centrado en comprender la función y estructura de la polifenol oxidasa. Diversos compuestos como el ácido cítrico, el ácido ascórbico, la L-cisteína o el glutatión, tienen efectos inhibitorios significativos sobre la actividad de la PPO. Aunque hay varios estudios sobre la actividad inhibidora de la enzima, no hay mayores informes sobre los sitios de unión y los mecanismos de inhibición de ésta (Qian-Yun *et al.*, 2021). Una mejor comprensión de los inhibidores y sus interacciones con la PPO puede generar valiosos conocimientos sobre qué compuestos serían los más adecuados como inhibidores y por qué.

MATERIALES Y MÉTODOS

La estructura de la polifenol oxidasa (MdPPO₁) se obtuvo del *Protein Data Bank (PDB)* (RCSB PDB, s.f), los criterios principales de la selección, fueron la resolución de la técnica con la que se determinó la estructura, que los valores atípicos de cadenas laterales, ángulos de Ramachandran y RSRZ no fueran excesivos o se encontraran en rangos inadecuados. De este modo, se seleccionó la estructura identificada con el código PDB: 6ELS; ésta, fue obtenida por cristalografía de rayos X y cuenta con una excelente resolución de 1.35 Å (Kampatsikas *et al.*, 2019); además, el resto de índices cristalográficos están en valores adecuados. Como preparación para usar la estructura seleccionada en los acoplamientos, se removieron los ligandos que contenía y las moléculas de agua.

Referente a las estructuras de los ligandos, éstas se obtuvieron de la base de datos *Pubchem* (National Center for Biotechnology Information, s.f). Para aquellos compuestos en que la estructura solo estaba disponible en representación 2D, se procedió a generar la estructura 3D con el paquete de *software* openbabel. Posteriormente, su geometría molecular fue llevada hasta un mínimo local en la superficie de energía potencial empleando métodos de estructura electrónica, en el marco de la teoría del funcional de la densidad, con el potencial intercambio y correlación B3LYP y el conjunto base 6-311G(d,p), tal como están implementados en el paquete *Gaussian 16* (Frisch *et al.*, 2016).

Las simulaciones de *docking* molecular se realizaron en el *software Autodock Vina* (Eberhardt *et al.*, 2021) (Trott & Olson, 2010), dentro de los parámetros a considerar para este paso, la exhaustividad se incrementó del valor por defecto de 8 a 24 y se estableció como límite de energía entre configuraciones 3.0 kcal/mol, para cerciorarse propiamente del sitio de interacción, las simulaciones se repitieron 10 veces. El sitio de búsqueda, se definió mediante una caja que encerraba toda la estructura proteica, dándole así al ligando, la libertad de buscar entre toda la estructura el sitio óptimo de interacción.

El post procesamiento de la información se realizó en el paquete *Discovery Studio*. Todos las simulaciones y el post procesamiento fueron realizados en equipos de cómputo del Laboratorio de Modelado Molecular y Materiales del Centro Universitario de los Lagos y en la supercomputadora Leo Atrox del Centro de Análisis de Datos y Supercómputo de la Universidad de Guadalajara (CADS).

RESULTADOS

Previo a discutir los resultados obtenidos en el presente trabajo, consideramos necesario precisar algunas consideraciones teóricas para que resulte más sencilla la interpretación de los mismos.

Es importante mencionar que las energías de afinidad de unión —o *score*, como comúnmente se le llama en la literatura relacionada— que se estiman a través de AutoDock Vina, incluyen términos que dan cuenta de los impedimentos estéricos, interacciones hidrofóbicas y puentes de hidrógeno. Además, para estimar estas energías de afinidad de unión, o *score* —por simplicidad, en lo sucesivo se usará sólo *score*—, AutoDock Vina toma en cuenta el número de enlaces rotables, lo que contribuye a que este parámetro no dependa por completo del tamaño de los ligandos y permite realizar un análisis comparativo entre éstos. La interpretación de los *score* reportados en la Tabla 1 es: cuanto menor sea el valor del *score*, representa una mayor afinidad en la interacción del ligando con la proteína, ya que, el valor de *score*, es proporcional a la energía libre de Gibbs asociada a la formación del complejo.

Por otro lado, en la última columna de la Tabla 1, se muestran los promedios de la desviación cuadrática media (RMSD). Para entender mejor este parámetro, consideremos lo siguiente: en cada simulación que se

realiza, se pueden obtener hasta 10 configuraciones del complejo, y para cada una se obtiene se calcula el RMSD. Este estadístico mide qué tan diferentes, geoméricamente hablando, son las conformaciones respecto a la de mejor *score*; cuanto más pequeño sea el RMSD para la enésima confirmación, más se parece la orientación molecular de éste con la de mejor *score*. Como consecuencia de esto, podemos asumir que valores bajos, en el promedio de los RMSD de cada conformación, implican una tendencia sobre el sitio en que el ligando interactúa con la proteína.

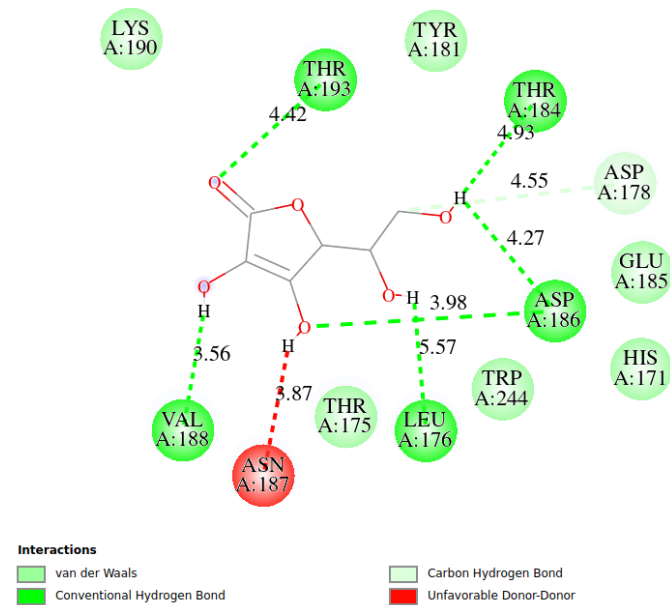
Así pues, en la Tabla 1, se muestran los *score* en kcal/mol y los valores promedio de RMSD para los complejos de la MdPPO₁ con el glutatión, ácido cítrico, ácido ascórbico y L-cisteína, también.

Tabla 1. Compilación de los resultados de docking con diversos compuestos.

Complejo	Score (kcal/mol)	Promedio RMSD
MdPPO ₁ – ácido ascórbico	-6.3	1.4970
MdPPO ₁ – cisteína	-4.1	22.6380
MdPPO ₁ – ácido cítrico	-6.4	4.9405
MdPPO ₁ – glutatión	-6.5	5.1672

De los valores de la Tabla 1, se puede apreciar que el compuesto que presenta el mejor acoplamiento con la MdPPO₁ es el glutatión, con -6.5 kcal/mol, y en orden descendente de la afinidad, le siguen el ácido cítrico, el ácido ascórbico y la L-cisteína. Para comprender mejor el por qué de los *scores* obtenidos, en las Figuras 1 a 4 se muestran los diagramas de interacción de cada ligando.

Figura 1. Diagrama de interacciones del ácido ascórbico con la MdPPO1.

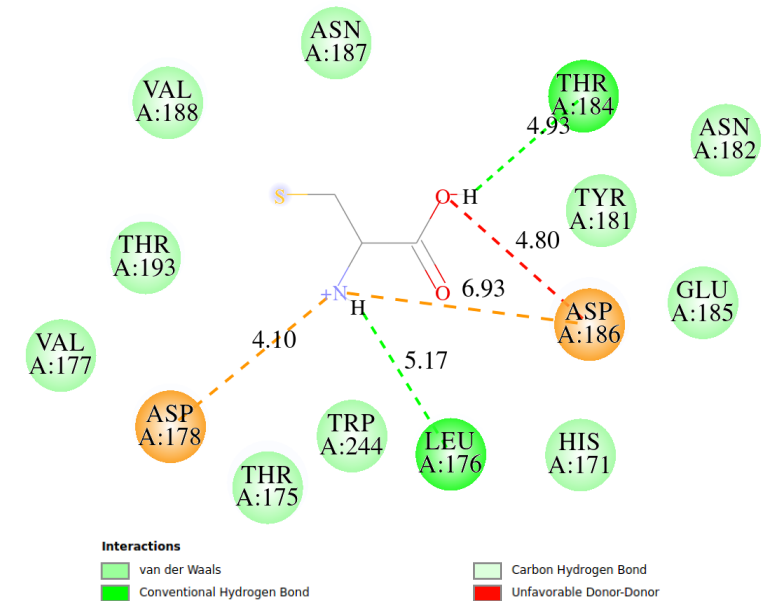


Nota. Muestran en tonalidades de verde las interacciones favorables y en rojo la única interacción no favorable, originada por la cercanía de dos especies donadoras de puentes de hidrógeno.

En el caso de ácido ascórbico (Figura 1), se puede apreciar que las interacciones que dan lugar a la formación de un complejo con la MdPPO₁, son principalmente puentes de hidrógeno e interacciones de tipo van der Waals; éstas, se consideran interacciones favorables, ya que constituyen energías de amarre en la interacción intermolecular. En la formación de este complejo se puede identificar también, un puente que forma el hidrógeno de un carbono con un oxígeno en el ácido ascórbico. Esta interacción se da entre el ASP 178 y un grupo alcohol del ligando. Si bien, este tipo de interacción es más débil que la de un puente de hidrógeno de más polaridad, como los que se establecen entre moléculas de agua, ésta aún supone una interacción estabilizadora del complejo. Por el otro lado, dentro de las interacciones desfavorables, la única que se puede apreciar en la Figura 1, es la repulsión donador-donador, este tipo de interacción es debida a la cercanía de dos especies capaces de actuar como donadores de puente de

hidrógeno; esto tiene como origen, por el lado del ligando, el hidrógeno de un grupo alcohol; y por el lado de la proteína, los hidrógenos del grupo amino presentes en la ASN 187.

Figura 2. Diagrama de interacciones de la L-cisteína con la MdPPO1.

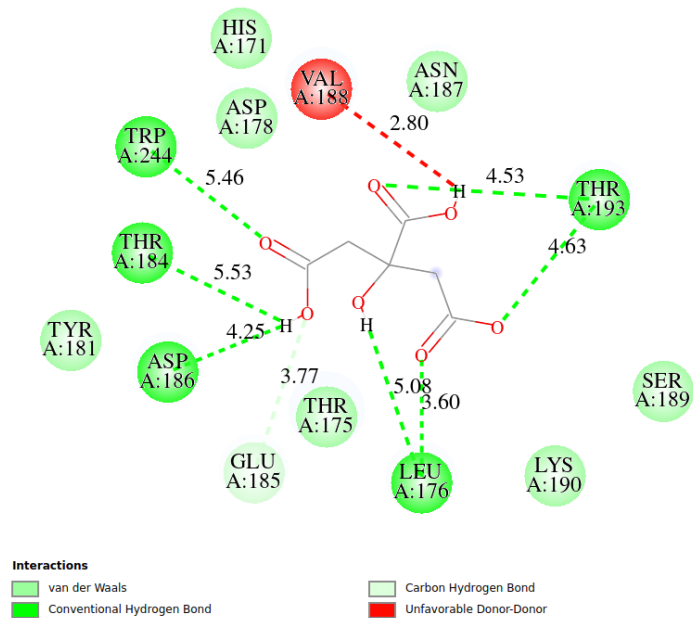


Nota. Muestran en tonalidades de verde y naranja las interacciones favorables, y en rojo la única interacción no favorable, originada por la cercanía de dos especiesceptoras de puentes de hidrógeno.

Para la L-cisteína (Figura 2), se observa que en el complejo formado con la MdPPO₁, resalta la presencia de interacciones de tipo van der Waals y puentes de hidrógeno. También se observa interacción de la proteína con los residuos ASP 178 y ASP 186, que pueden tratarse de interacciones carga-carga entre el grupo amino del inhibidor y el grupo carboxilo del ácido aspártico. La unión no favorable aceptor-aceptor de este complejo, se presenta entre el grupo alcohol del ligando y el residuo ASP 178. Usualmente, la energía de estabilización debida a las interacciones carga-carga, es varias veces mayor que la de las interacciones por puentes de hidrógeno; sin embargo, el *score* es menos favorable en comparación a otros inhibidores.

Podrían deberse a que una de estas interacciones carga-carga tiene una distancia relativamente grande, a diferencia de la cercanía que muestra la interacción no favorable de aceptor-aceptor.

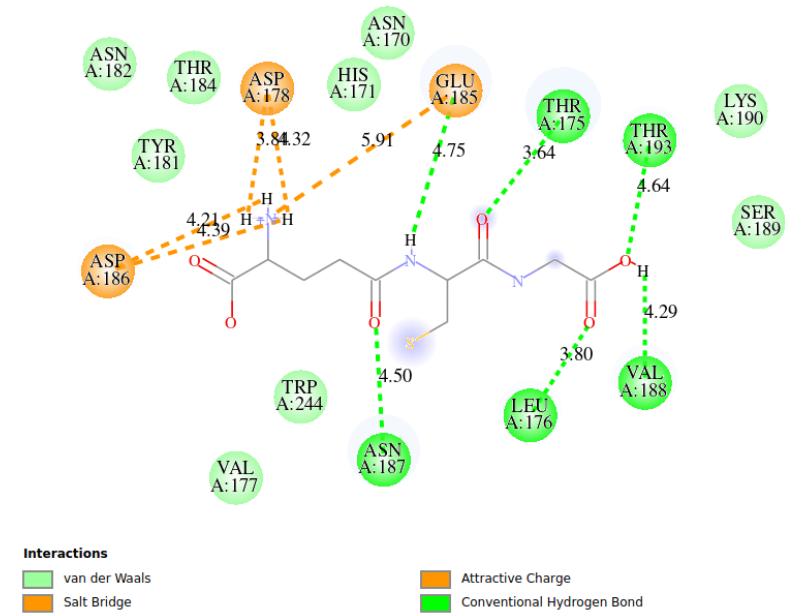
Figura 3. Diagrama de interacciones del ácido cítrico con la MdPP01



Nota. Muestran en tonalidades de verde las interacciones favorables, y en rojo la única interacción no favorable, originada por la cercanía de dos especies donadoras de puentes de hidrógeno.

Con respecto al complejo formado con el ácido cítrico (Figura 3), destaca la presencia de puentes de hidrógeno e interacciones de tipo van der Waals. También, se puede observar una interacción de puente de hidrógeno que tiene lugar, entre un hidrógeno poco polar unido a un carbono, éste se da entre el residuo GLU 185 y un grupo alcohol del ligando; ésta, supone una interacción estabilizadora del complejo, aunque algo más débil que un puente de hidrógeno convencional. Se presenta una repulsión donador-donador entre el hidrógeno de un grupo alcohol del ligando y los hidrógenos del grupo amino del residuo VAL 188.

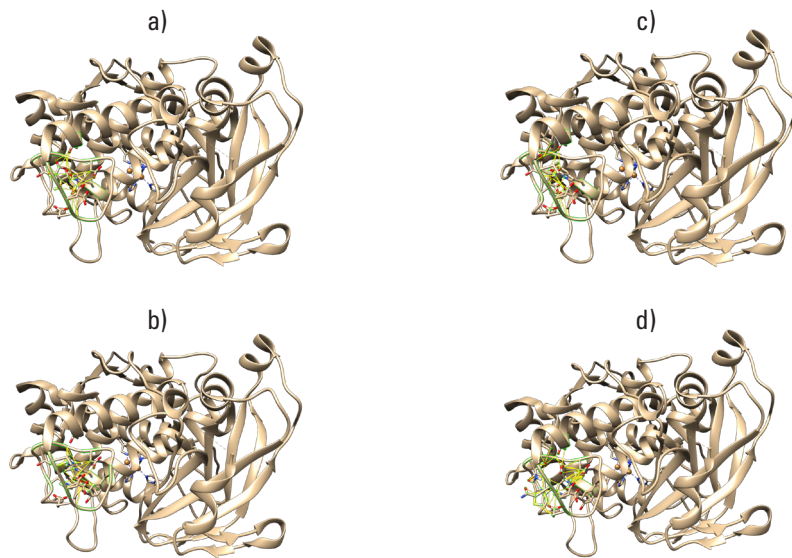
Figura 4. Diagrama de interacciones del glutatión con la MdPP01



Nota. Muestran en tonalidades de verde y naranja las interacciones favorables.

Finalmente, para el complejo formado por la MdPP01 y el glutatión (Figura 4), se pueden distinguir interacciones de tipo van der Waals y puentes de hidrógeno, en su mayoría. También están presentes interacciones atractivas, como los puentes salinos que se forman entre el grupo amino del ligando y los grupos carboxilos de los residuos de aminoácidos conjuntos, que son ASP 178, ASP 186 y GLU 185. En comparación con los demás inhibidores, este ligando fue el único en el que no se observan interacciones no favorables en el diagrama generado, y que presenta puentes salinos; lo cual se relaciona directamente con el *score* obtenido, puesto que este complejo fue el que reportó una mayor energía de afinidad.

Figura 5. Estructuras 3D de los complejos formados por MdPPO1



Nota. a) ácido ascórbico b) cisteína c) ácido cítrico d) glutatión, se muestra la misma orientación de la estructura proteica, se puede apreciar claramente que todos los ligandos tienden al mismo sitio de unión.

Basándonos en los diagramas de interacción y en la estructura 3D de los complejos realizados (Figura 5), se observa que los cuatro inhibidores se unen a un mismo sitio activo de la MdPPO1, ubicado en un *pocket* con capacidad de aceptar y donar puentes de hidrógeno; y los ligandos se encontraban rodeados por residuos de aminoácidos, entre los que se incluyen THR 175, LEU 176, ASP 178, THR 184, ASP 186, VAL 188 y TRP 244.

CONCLUSIONES

Tras la realización del presente trabajo, nuestros resultados sugieren que el glutatión funge como el mejor inhibidor de la MdPPO1 y podemos considerar que este resultado es consecuencia de las numerosas interacciones favorables entre éste ligando y el *pocket* identificado. Otro aspecto importante es el tipo de dichas interacciones. Éstas, no sólo se limitan a puentes de hidrógeno o van der Waals, sino que establece interacciones que pueden ser más fuertes como puentes salinos y atracción carga-carga, las

cuales, decaen más lento con la distancia ($1/r$), y por lo tanto, constituyen mayores energías de amarre que las van der Waals ($1/r^{12}$). Adicionalmente, vale la pena destacar la ausencia de interacciones no favorables que desestabilicen la interacción del complejo.

Aunado a lo anterior, podemos concluir que al menos desde el enfoque de este trabajo, el glutatión podría ser un excelente inhibidor de la MdPPO1, no solo por el *score* obtenido, sino también por el tipo de interacciones carga-carga que establece con la proteína. En la literatura se ha reportado que un valor de pH bajo no es el óptimo para la reacción enzimática y la alteración de éste puede desempeñar un papel en la inhibición de la enzima, además, se menciona que las interacciones carga-carga y de puentes salinos pueden modificar el pH del medio, debido al cambio que induce en las cadenas laterales de la proteína, y por ende, cambia su forma (Lante *et al.*, 2016).

El trabajo de investigación *in silico* puede aportar a lograr un profundo entendimiento de sistemas biológicos, con ello es posible optimizar procesos y/o lograr mejoras en la producción alimentaria. Si bien en los resultados del presente trabajo se obtiene que el glutatión pudiese ser el inhibidor más eficaz de esta PPO, es preciso realizar un estudio más profundo, realizando acoplamiento flexible y aislando el sitio activo para entender de forma más completa el mecanismo de acción.

REFERENCIAS

- Eberhardt, J., Santos-Martins, D., Tillack, A.F., & Forli, S. (2021). AutoDock Vina 1.2.0: New docking methods, expanded force field, and python bindings. *Journal of chemical information and modeling*, 6(8), 3891-3898.
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Li, X., Caricato, M., Marenich, A.F., Bloino, J., Janesko, B.G., Gomperts, R., Mennucci, B., Hratchian, H.P., Ortiz, J.V., ... Fox, J. (2016). *Gaussian 16*. [Software]. Wallingford, CT: Gaussian, Inc.
- Kampatsikas, I., Bijelic, A., Pretzler, M., & Rompel, A. (2019). Peptide-Induced Self-Cleavage Reaction Initiates the Activation of Tyrosinase. *Angewandte Chemie International Edition*, 58(22), 7475-7479.
- Lante, A., Tinello, F., & Lomolino, G. (2016). The use of polyphenol oxidase activity to identify a potential raisin variety. *Food Biotechnology*, 30, 98-109. ScienceDirect. 10.1080/08905436.2016.1166125
- Lante, A. y Zocca, F. (2010). Effect of β -cyclodextrin addition on quality of precooked vacuum

- packed potatoes. *LWT - Food Science and Technology*, 43(3), 409-414. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2009.09.002>
- National Center for Biotechnology Information. (s.f.). PubChem. Retrieved October 22, 2023, from <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- Qian-Yun, H., Fang, L., Xin, W. y Yuan-Ying, N. (2021). Kinetic, spectroscopic and molecular docking studies on the inhibition of membrane-bound polyphenol oxidase from Granny Smith apples (*Malus domestica* Borkh). *Food Chemistry*, 338(127928). <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.127928>
- RCSB PDB. (s.f.). RCSB PDB: Homepage. Retrieved October 22, 2023, from <https://www.rcsb.org/>
- Tinello, F. y Lante, A. (2018). Recent advances in controlling polyphenol oxidase activity of fruit and vegetable products. *Innovative Food Science and Emerging Technologies*, 50, 73-83. ScienceDirect. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2018.10.008>
- Trott, O. y Olson, A.J. (2010). AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of computational chemistry*, 31(2), 455-461.

Modelado de moléculas utilizadas en celdas solares orgánicas

CAROLINA LARIOS SOTO
carolina.larios4800@alumnos.udg.mx

JAIME GUSTAVO RODRÍGUEZ ZAVAL
jaime.rzavala@academicos.udg.mx

RESUMEN

En la actualidad es indispensable el desarrollo de nuevas innovaciones tecnológicas y sustentables, por ello en los últimos años ha surgido un interés hacia las celdas solares orgánicas, uno de los retos por enfrentar es la eficiencia de éstas. Gracias al modelado molecular es posible obtener resultados teóricos sobre las características de una molécula, con lo anterior es viable predecir las características de esta, la cual, a su vez podría ser usada eficientemente en una celda solar. Debido a lo anterior, en el presente trabajo se computan distintos parámetros relacionados con el proceso fotovoltaico en una celda solar orgánica. En este trabajo nos centramos en el impacto de las modificaciones realizadas en la molécula altamente eficiente Y6 para analizar los parámetros implicados en el proceso fotovoltaico y la eficiencia de una celda solar orgánica.

PALABRAS CLAVE

Estructura electrónica (Electronic structure); Celdas solares orgánicas (Organic solar cells); Teoría del funcional de la densidad (Density functional theory); Modelado molecular (Molecular modeling); Moléculas pequeñas (Small molecules).

INTRODUCCIÓN

Los aceptores no fullerenos —NFA, del Inglés *Non-fullerene acceptors*— son moléculas utilizadas en las celdas solares orgánicas —OSC, del Inglés *Organic Solar Cells*— y actualmente siguen impulsando la investigación con

el objetivo de encontrar el material más conveniente para incrementar la eficiencia y estabilidad de las celdas solares. Dentro de este grupo de NFA, la molécula Y6 (BTP-4F) representada en la Figura 1, comenzó a resaltar por su eficiencia al utilizarse en OSC, (Cui et al., 2019) debido a ello los investigadores han buscado realizar diferentes modificaciones moleculares que puedan contribuir de manera significativa a la eficiencia de conversión de energía (ECE) de las OSC. Posteriormente la molécula Y7 (BTP-4Cl), visible en la Figura 2, que es la forma clorada de la molécula anterior, (Yuan et al., 2019) comenzó a interesar por los favorables resultados obtenidos.

Por otro lado, recientemente se han realizado modificaciones cambiando el grupo central por Quinoxalina (Qiu et al., 2023) y se han encontrado resultados prometedores. Nosotros realizamos tres modificaciones que nos parecieron pertinentes y nos sirvieron de parámetro para realizar comparaciones con las demás moléculasceptoras estudiadas.

Cualquier modificación en las moléculas va a afectar las propiedades que tendrá y es importante obtener resultados con las diferentes moléculas modeladas para detectar a aquellas que tengan las mejores propiedades electrónicas necesarias para incrementar la eficiencia de las OSC.

Figura 1. Estructura de la molécula Y6.

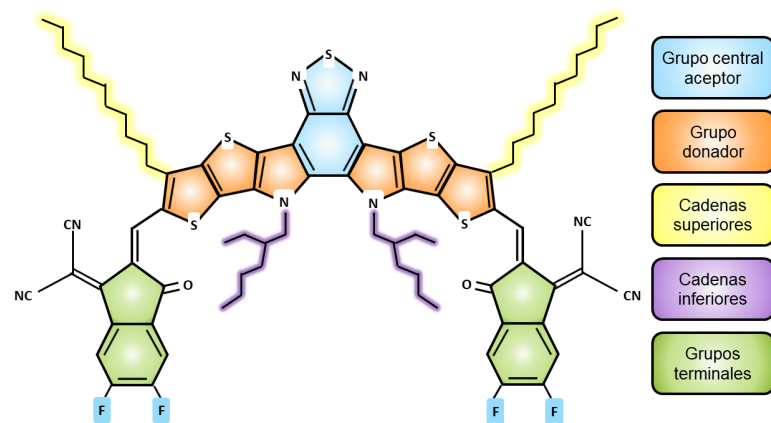
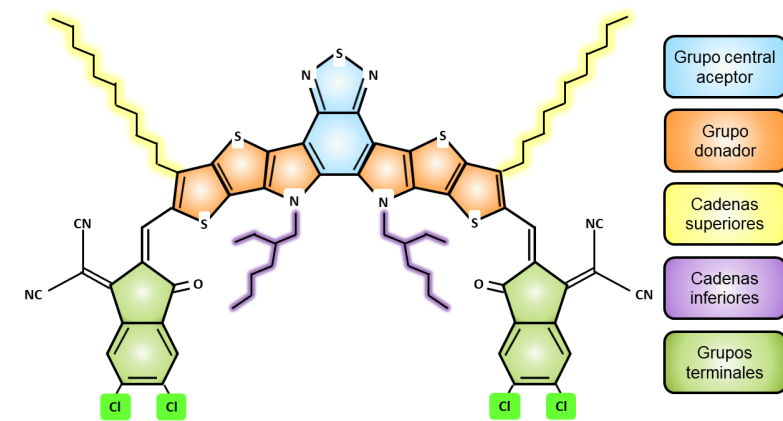


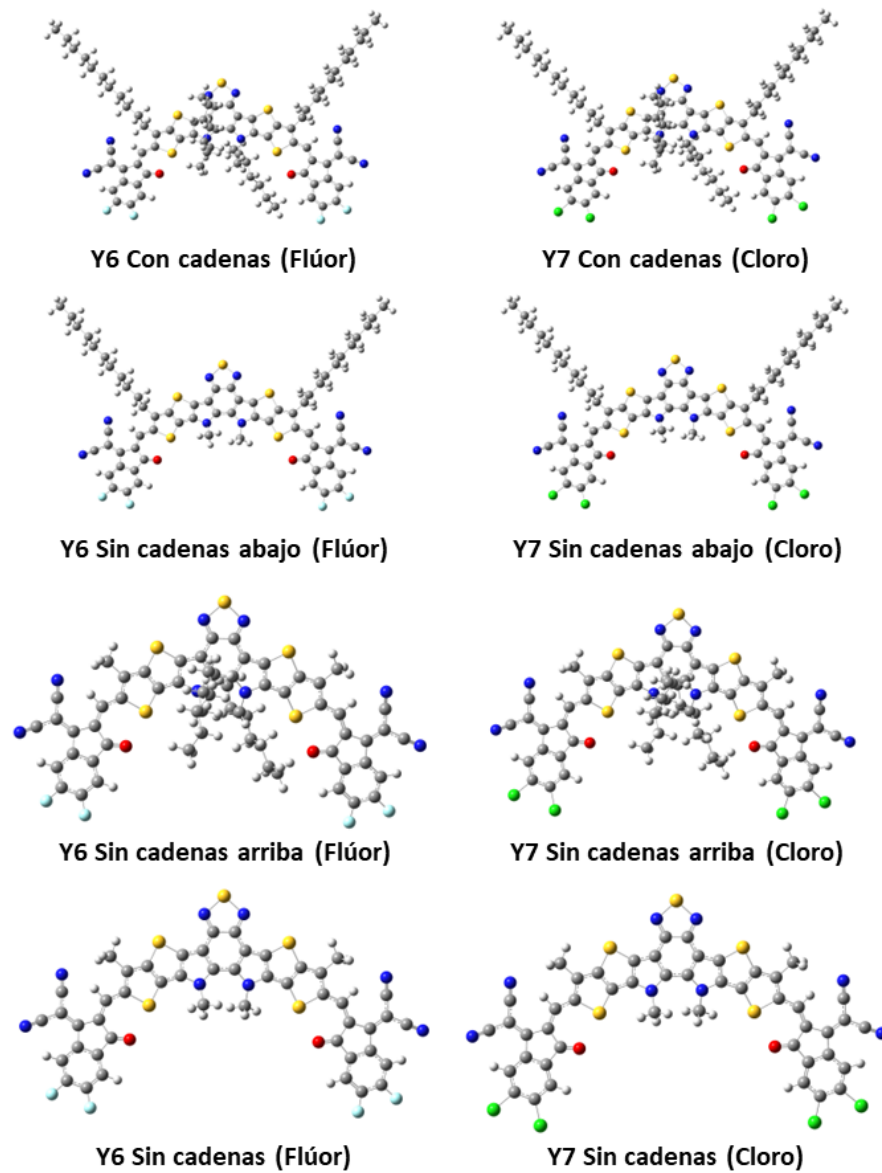
Figura 2. Estructura de la molécula Y7.



MATERIALES Y MÉTODOS

Utilizando el paquete computacional *Gaussian 16* (Frisch et al., 2016) bajo el esquema de la Teoría del Funcional de la Densidad, con el funcional de intercambio y correlación HSEH1PBE y un conjunto base 6-31G, se realizó el modelado de la molécula Y6, siendo ésta la primera molécula y conteniendo en los grupos terminales átomos de Flúor; para la segunda molécula se intercambian los átomos de Flúor por Cloro y la nombramos como Y7. Posteriormente se realizaron modificaciones en las cadenas adyacentes de carbono abiertas saturadas para conocer las implicaciones de simplificar una molécula. Obtuvimos cuatro estructuras diferentes tal como se muestra en la Figura 3, la primera con todas las cadenas; la segunda sin las cadenas inferiores, la tercera sin las cadenas superiores y la última sin todas las cadenas; cada una con sus respectivos átomos de Flúor y Cloro en los grupos terminales.

Figura 3. Moléculas modeladas Y6 y Y7 con sus respectivas variaciones.



Adicional a lo anterior, realizamos modificaciones al grupo central de la molécula Y6 representadas en la Figura 4; primero se efectuó un cambio del átomo de azufre por nitrógeno unido a un radical metilo; posterior a eso, cambiamos el grupo central por Quinoxalina unido a dos radicales metilos; por último, los radicales metilos de la segunda molécula se cambiaron por Tiofeno. Los cálculos se realizaron con la misma metodología funcional y conjunto base.

Finalmente, el potencial de ionización (I), la afinidad electrónica (A), la capacidad de transporte de hoyos (λ_+) y la capacidad de transporte de electrones (λ_-) se calcularon a través de las siguientes fórmulas,

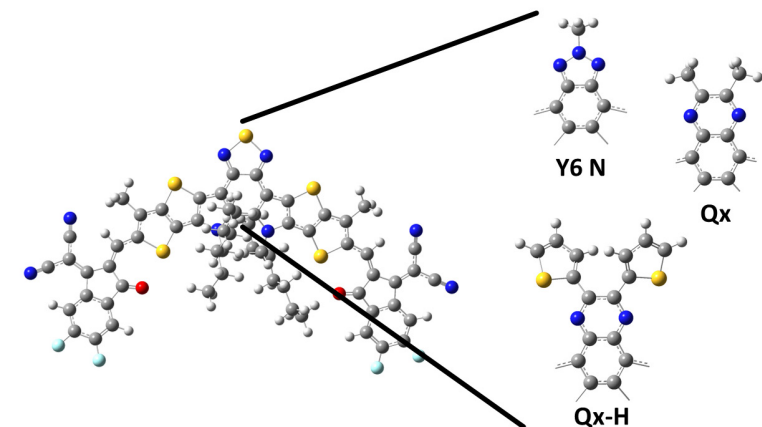
$$I = E(N - 1) - E(N)$$

$$A = E(N) - E(N + 1)$$

$$\lambda_+ = [E_0^+ - E_+] + [E_+^0 - E_0]$$

$$\lambda_- = [E_0^- - E_-] + [E_-^0 - E_0]$$

Figura 4. Modificaciones realizadas en el grupo central aceptor de la molécula Y6.



RESULTADOS

Impacto de la simplificación de las cadenas laterales de carbono abiertas saturadas en la molécula Y6. Con fines de simplificar y hacer referencia a las diferentes moléculas construidas, se nombran con la respectiva modificación hecha. A continuación, se presentan los resultados obtenidos.

POTENCIAL DE IONIZACIÓN Y AFINIDAD ELECTRÓNICA

Dos de las principales características que una molécula debe de resaltar cuando se usa en una capa fotoactiva de una celda solar orgánica de la clase de hetero-unión en volumen son: el Potencial de ionización y Afinidad electrónica. Dado que los sistemas analizados en el presente trabajo son usados como aceptores de electrones en la capa fotoactiva, nos centraremos en la cifra de la afinidad electrónica, esta cantidad nos permite conocer la capacidad de aceptar electrones, entre mayor sea este valor en comparación con otra molécula, mejor será su capacidad de recibir electrones comparada con la segunda. La mención clave en este contexto es la importancia de contar con un aceptador de electrones eficaz en la capa fotoactiva de la fotocelda. La presencia de un aceptador eficiente en esta capa es fundamental, ya que permite la disociación del excitón generado en el material donador.

Los valores de las energías obtenidas en los cálculos computacionales demostraron mínima diferencia (Tabla 1.1). Obtuvimos el valor más favorable de la afinidad electrónica (A) con la molécula Y7 Sin cadenas. Otra observación importante es la mejora de la capacidad aceptora por medio de la cloración de la molécula.

Tabla 1.1 Potencial de ionización (I) y afinidad electrónica (A) obtenidas en electronvoltios (eV).

Molécula	I (eV)	A (eV)
Y6 Con cadenas (Flúor)	6.642	3.094
Y7 Con cadenas (Cloro)	6.644	3.142
Y6 Sin cadenas abajo (Flúor)	6.708	3.112
Y7 Sin cadenas abajo (Cloro)	6.709	3.161
Y6 Sin cadenas arriba (Flúor)	6.684	3.104

Continúa sg. pg.

Y7 Sin cadenas arriba (Cloro)	6.686	3.152
Y6 Sin cadenas (Flúor)	6.753	3.122
Y7 Sin cadenas (Cloro)	6.753	3.171

ORBITALES MOLECULARES DE FRONTERA: HOMO, LUMO Y GAPHL

De acuerdo a la fórmula de Scharber (Romo-Gutiérrez et al., 2022),

$$V_{OC} = \left(\frac{1}{e}\right) (|E_{HOMO}^{donador} - E_{LUMO}^{aceptor}|) - 0.3V$$

La posición de los orbitales frontera HOMO y LUMO de los materiales donador y aceptor es crucial para el aumento en el voltaje a circuito abierto (V_{oc}), mismo que se encuentra relacionado directamente con la eficiencia de la fotocelda. Como bien se puede demostrar de la fórmula, entre más alta sea la posición del LUMO del aceptor mayor será el V_{oc} . Lo cual puede favorecer a la eficiencia.

De la Tabla 1.2 es posible observar que la posición del LUMO disminuye con la cloración, lo cual está de acuerdo con el reporte experimental (Cui et al., 2019). Por otra parte, la simplificación de las cadenas en el cálculo baja la posición de este orbital, esto puede ser un efecto remarcable para futuras investigaciones en estructura electrónica relacionadas con este tipo de sistemas moleculares y sus propiedades fotovoltaicas.

Tabla 1.2 HOMO, LUMO y GapHL calculados en electronvoltios (eV).

Molécula	LUMO	HOMO	ΔE GapHL (LUMO-HOMO)
Y6 Con cadenas (Flúor)	-4.017	-5.674	1.657
Y7 Con cadenas (Cloro)	-4.047	-5.691	1.644
Y6 Sin cadenas abajo (Flúor)	-4.049	-5.716	1.667
Y7 Sin cadenas abajo (Cloro)	-4.079	-5.733	1.654
Y6 Sin cadenas arriba (Flúor)	-4.048	-5.700	1.651
Y7 Sin cadenas arriba (Cloro)	-4.078	-5.717	1.638
Y6 Sin cadenas (Flúor)	-4.083	-5.743	1.660
Y7 Sin cadenas (Cloro)	-4.112	-5.760	1.648

MOMENTO DIPOLAR

El momento dipolar nos dice cómo se distribuye la carga eléctrica a través de una molécula, también nos brinda una noción sobre la interacción de la molécula en particular con otras moléculas y sus iguales.

Conforme simplificamos la molécula eliminando las cadenas adyacentes el momento dipolar se reduce de manera paulatina, tal como se aprecia en la Tabla 1.3. Este resultado resalta la importancia de tomar o no en cuenta las cadenas laterales en cálculos de estructura electrónica. Sobre todo cuando se quiere estudiar efectos morfológicos en la capa fotoactiva.

Tabla 1.3 Momento dipolar (Debye) de las diferentes moléculas.

Molécula	Con cadenas	Sin cadenas abajo	Sin cadenas arriba	Sin cadenas
Y6 (Flúor)	1.688	1.368	0.835	0.562
Y7 (Cloro)	1.697	1.406	0.798	0.515

ENERGÍAS DE REORGANIZACIÓN

La energía de reorganización puede verse como la barrera energética que se tiene que vencer para lograr el transporte de hoyos (λ_+) o electrones (λ_-). Entonces, a menor valor de λ , mejor capacidad de transportar hoyos o electrones. Para nuestro estudio nos interesaría el transporte de electrones, es decir, λ_- .

La molécula Y7 con cadenas presenta un sistema más eficiente para el transporte de electrones, como se muestra en la Tabla 1.4. Además, es notable que la simplificación de las cadenas no tiene un impacto significativo en el cálculo de su capacidad para transportar carga.

Tabla 1.4 Resultados de lambdas en electronvoltios (eV).

Molécula	λ_+ (eV)	λ_- (eV)
Y6 Con cadenas (Flúor)	0.154	0.123
Y7 Con cadenas (Cloro)	0.152	0.118
Y6 Sin cadenas abajo (Flúor)	0.147	0.125
Y7 Sin cadenas abajo (Cloro)	0.146	0.120
Y6 Sin cadenas arriba (Flúor)	0.155	0.130

Continúa sg. pg.

Y7 Sin cadenas arriba (Cloro)	0.153	0.126
Y6 Sin cadenas (Flúor)	0.148	0.130
Y7 Sin cadenas (Cloro)	0.146	0.125

ESPECTROS DE ABSORCIÓN

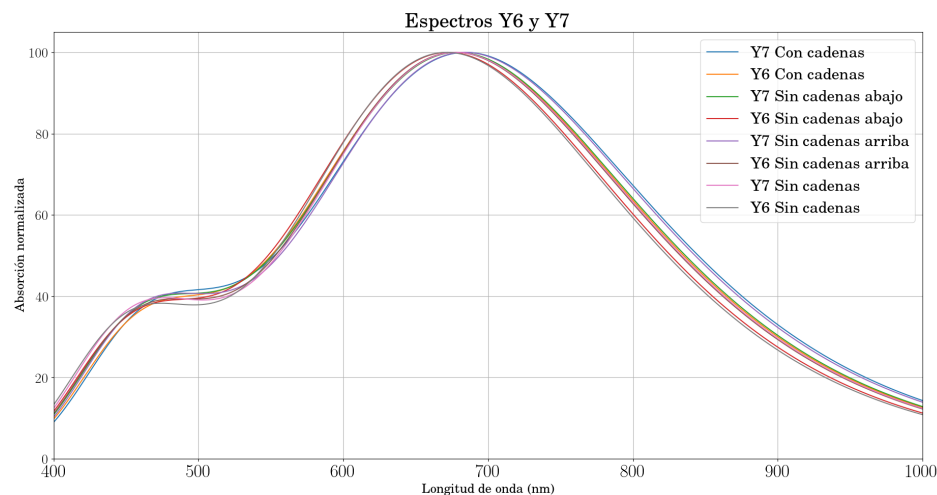
Los espectros de absorción proporcionan información acerca de la longitud de onda de la radiación electromagnética absorbida por un material específico, como se ilustra en la Figura 5, donde se puede apreciar la longitud de onda de las moléculas modeladas. Es evidente que a medida que se reducen las cadenas de carbono adyacentes, se observa un aumento en la intensidad del oscilador, lo que sugiere una tendencia clara.

El Y7 muestra una tendencia de absorción corrida al rojo en comparación con Y6, lo que significa que son mayores longitudes de onda y por ende, mejor absorción hacia el infrarrojo. Obtuvimos una mayor fuerza del oscilador para la molécula Y7 sin cadenas (Tabla 1.5).

Tabla 1.5 Espectros de absorción (Longitud de onda, fuerza del oscilador y niveles energéticos).

Molécula	Longitud de onda (nm)	Fuerza del oscilador
Y6 Con cadenas	685.12	1.969
Y7 Con cadenas	692	2.007
Y6 Sin cadenas abajo	679.06	2.094
Y7 Sin cadenas abajo	685.96	2.132
Y6 Sin cadenas arriba	683.24	2.002
Y7 Sin cadenas arriba	690.12	2.042
Y6 Sin cadenas	676.98	2.142
Y7 Sin cadenas	683.79	2.182

Figura 5. Espectros de absorción de las diferentes moléculas Y6 y Y7.



RESULTADO DE MODIFICACIONES EN EL GRUPO ACEPTOR CENTRAL DE LA MOLÉCULA Y6

En esta sección, con el objetivo de identificar a las diferentes moléculas, nombramos a la molécula con la modificación del átomo de azufre por nitrógeno y un grupo metilo como Y6 N; a la molécula siguiente como Qx que contiene Quinoxalina con dos grupos radicales metilos en el grupo aceptor central y por último la molécula Qx-H, similar a la anterior contiene dos grupos Tiofeno que reemplazan a los radicales metilos.

POTENCIAL DE IONIZACIÓN Y AFINIDAD ELECTRÓNICA

Los valores de las energías obtenidas en los cálculos computacionales demostraron mínima diferencia, es decir, el cambio de los grupos centrales de la molécula tiene poco impacto en la capacidad donadora o aceptora de las moléculas estudiadas. Por otro lado, obtuvimos el valor más provechoso, por muy poco, de la afinidad electrónica (A) con la molécula Y7 con cadenas (Tabla 2.1).

Tabla 2.1 Potencial de ionización (I) y Afinidad electrónica (A) obtenidas en electronvoltios (eV).

Molécula	I (eV)	A (eV)
Y6 Con cadenas	6.642	3.094
Y7 Con cadenas	6.644	3.142
Y6 N	6.507	2.999
Qx	6.507	2.980
Qx-H	6.471	3.000

ORBITALES MOLECULARES DE FRONTERA: HOMO, LUMO Y GAPHL

Obtuvimos a la molécula Y6 N como la molécula con menor Gap, por lo que al hacer referencia a los orbitales moleculares de frontera podemos colocarla como la molécula con mejor valor, sin embargo, los resultados tampoco presentaron variaciones significativas (Tabla 2.2). Las moléculas quinoxiladas suben un poco el LUMO, lo cual es bueno para obtener un aumento en el V_{oc} .

Tabla 2.2 HOMO, LUMO y GapHL calculados medidos en electronvoltios (eV).

Molécula	LUMO	HOMO	ΔE_{GapHL} (LUMO-HOMO)
Y6 Con cadenas	-4.017	-5.674	1.657
Y7 Con cadenas	-4.047	-5.691	1.644
Y6 N	-3.921	-5.537	1.615
Qx	-3.895	-5.549	1.654
Qx-H	-3.900	-5.547	1.647

El momento dipolar más alto fue el que presentó la molécula Qx-H, indicándonos que esta molécula tiene más polaridad y por ello tendrá mejores interacciones con otras moléculas (Tabla 2.3). Notablemente se observa una gran variación en el momento dipolar con la modificación del grupo central aceptor. Debido a ello, podemos esperar grandes diferencias en cuanto a morfología de la capa fotoactiva cuando se introducen diferentes tipos de grupos centrales en Y6.

Tabla 2.3 Momento dipolar (Debye) de las diferentes moléculas.

Molécula	Momento dipolar
Y6 Con cadenas	1.688
Y7 Con cadenas	1.697
Y6 N	5.852
Qx	5.983
Qx-H	6.709

ENERGÍAS DE REORGANIZACIÓN

Obtenemos el valor de las lambdas que nos describe el transporte de electrones y apreciamos que la molécula Qx-H demostró tener un menor valor para λ_1 (Tabla 2.4). En general, no hay grandes variaciones de capacidad de transporte de cargas con la modificación del grupo central aceptor.

Tabla 2.4 Lambdas calculadas de las moléculas correspondientes en electronvoltios (eV).

Molécula	λ_1 (eV)	λ_2 (eV)
Y6 Con cadenas	0.154	0.123
Y7 Con cadenas	0.152	0.118
Y6 N	0.153	0.115
Qx	0.156	0.110
Qx-H	0.158	0.109

ESPECTROS DE ABSORCIÓN

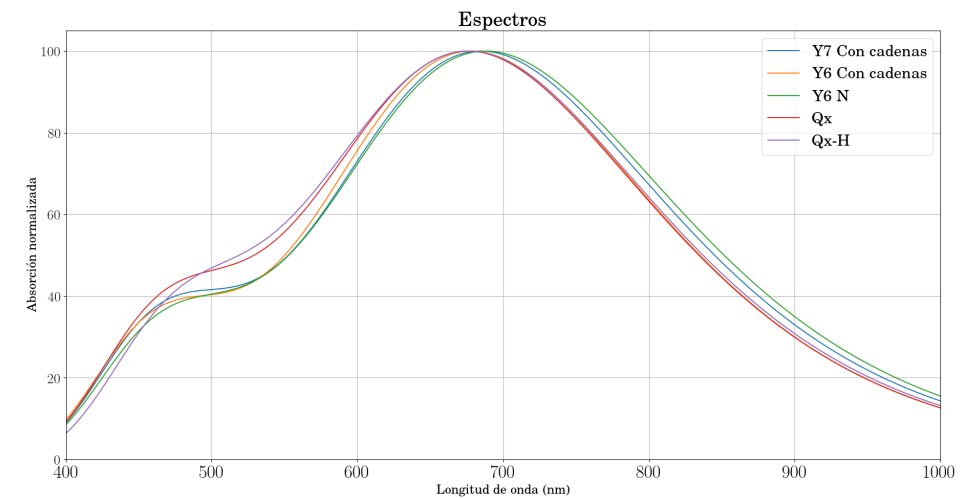
Los espectros de absorción nos permiten conocer la longitud de onda de la radiación electromagnética que absorbe un determinado material. Este espectro de las moléculas estudiadas se aprecia en la Figura 6.

El Y6 N muestra una tendencia de absorción corrida al rojo en comparación con las demás moléculas propuestas, lo que significa que son mayores longitudes de onda y por ende mejor absorción hacia el infrarrojo. La mayor fuerza del oscilador la presentó la molécula Y7 Con cadenas (Tabla 2.5). La posición del pico principal no se ve muy afectada por los diferentes grupos centrales aceptores.

Tabla 2.5 Espectros de absorción (Longitud de onda, fuerza del oscilador y niveles energéticos).

Molécula	Longitud de onda (nm)	Fuerza del oscilador
Y6 Con cadenas	685.12	1.969
Y7 Con cadenas	692	2.007
Y6 N	697.09	1.949
Qx	686.08	1.927
Qx-H	689.75	1.848

Figura 6. Espectros de absorción de las moléculas con diferentes grupos centrales aceptores.



CONCLUSIONES

Gracias a los aportes de la ciencia y la tecnología se ha logrado mejorar el funcionamiento de las celdas solares orgánicas de manera significativa. Esto es crucial para colaborar con el desarrollo de dispositivos energéticos que logren satisfacer las necesidades energéticas del mundo actual de manera sustentable, aprovechando recursos renovables que nos permitan satisfacer la exigencia energética sin comprometer recursos no renovables.

Concluimos que, la reducción de cadenas de carbono abiertas saturadas de una molécula compleja para realizar cálculos no compromete de

manera significativa los resultados de estructura electrónica relacionada con la eficiencia energética de las celdas solares orgánicas; además de comprobar que la versión clorada es más eficiente en comparación con la fluorada cuando nos referimos a las OSC. Como ya había sido reportado anteriormente en 2022 (Romo-Gutiérrez et al., 2022). El momento dipolar de la molécula es el parámetro más afectado con la variación, tanto de cadenas laterales, como del grupo central aceptor. Es debido a esto último que creemos que la modificación de estas características moleculares impactarían de mayor manera en la morfología de la capa fotoactiva.

Es importante continuar realizando modificaciones a la molécula para conocer las implicaciones y lograr proponer un material que logre mejorar aún más el poder de conversión de energía de la celda. El modelado molecular nos otorga muchas herramientas para hacer cálculos necesarios para conocer características de una determinada molécula, predecir su comportamiento y la capacidad que tendrá para cumplir con el objetivo que se le otorgó, colaborando así a la investigación y contribuyendo con avances tecnológicos para la sociedad.

REFERENCIAS

- Cui, Y., Yao, H., Zhang, J., Zhang, T., Wang, Y., Lei, H., Xian, K., Xu, B., Zhang, S., Peng, J., Wei, Z., Gao, F. y Hou, J. (2019). Over 16% efficiency organic photovoltaic cells enabled by a chlorinated acceptor with increased open-circuit voltages. *Nature Communications*, 10(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10351-5>
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Li, X., Caricato, M., Marenich, A. V., Bloino, J., Janesko, B. G., Gomperts, R., Mennucci, B., Hratchian, H. P., Ortiz, J. V., ... Fox, D. J. (2016). *Gaussian 16 Revision C.01*. [Software]. Wallingford, CT: Gaussian, Inc.
- Qiu, D., Zhang, J., Lü, K., Wei, Z. (2023). Halogenated thiophene substitutions on quinoxaline unit to achieve morphology optimization in efficient organic solar cells. *Nano Research*, 16(9), 11630-11637. <https://doi.org/10.1007/s12274-023-5723-x>
- Romo-Gutiérrez, A., Cisneros-García, Z. y Rodríguez-Zavala, J. (2022). Improvement of photovoltaic-related parameters through bromination and the role of chlorine, bromine, iodine, and dehalogenation in the fluorinated Y6 small molecule. *Molecular Physics*, 120(23). <https://doi.org/10.1080/00268976.2022.2135466>
- Solar Cell with over 15% Efficiency Using Fused-Ring Acceptor with Electron-Deficient. *Core. Joule*, 3(4), 1140-1151. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2019.01.00>

- Wei, Q., Yuan, J., Yi, Y., Zhang, C. y Zou, Y. (2021). Y6 and its derivatives: molecular design and physical mechanism. *National Science Review/National Science Review*, 8 (8). <https://doi.org/10.1093/nsr/nwab121>
- Yuan, J. y Zou, Y. (2022). The history and development of Y6. *Organic Electronics*, 102, 106436. <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2022.106436>
- Yuan, J., Zhang, Y., Zhou, L., Zhang, G., Yip, H., Lau, T., Lu, X., Zhu, C., Peng, H., Johnson, P. A., Leclerc, M., Cao, Y., Ulański, J., Li, Y. y Zou, Y. (2019). *Single-Junction Organic*. Science direct.

Diseño de un agente inteligente aplicado en la limpieza, análisis y representación de bases de datos bibliográficas

JUAN ALBERTO VELOZ ROMO
juan.veloz@alumnos.udg.mx

JESÚS RICARDO SEVILLA ESCOBOZA
jesus.sescoboza@academicos.udg.mx

RESUMEN

A partir de una base de datos establecida se busca la generación de etiquetas para analizar todas las formas posibles de llamar a un investigador en particular, de modo que los investigadores no aparezcan múltiples veces al momento de generar nuestra red de colaboración, aumentando la eficiencia del algoritmo. Para lograr esto, se utiliza un proceso de inferencia específico que permite analizar cada uno de los posibles nombres para determinar cuáles son más similares entre sí. Luego, para aquellos nombres que presenten cierto margen de incertidumbre, se le consulta al usuario para que confirme si el nombre en cuestión es válido. Si es así, se agrega a una matriz de etiquetas. Completados estos pasos para todos los nombres, las etiquetas se vinculan con los nombres correspondientes, posteriormente procedemos a realizar el análisis para construir una matriz de adyacencia. Una vez con la matriz de adyacencia establecemos los nodos, los ejes y los pesos y procedemos a crear el grafo dirigido, para desplegarlo y que el individuo final pueda tener una previsualización de esta red de colaboración.

PALABRAS CLAVE

Grafo (Graph), Redes académicas (Academic research networks), Sistema de inferencia (Inference System), Generador de etiquetas (Tag Generator), Redes de Investigación (Research Networks).

INTRODUCCIÓN

Una red compleja se define como una estructura formada por múltiples elementos interconectados, representados por nodos y enlaces. En el contexto del universo de Marvel, cada superhéroe puede considerarse un nodo que se conecta con otros a través de colaboraciones en cómics, lo que constituye una red compleja basada en las interacciones entre ellos. Al profundizar en esta idea, podemos determinar quién es el superhéroe más conocido analizando quién tiene más apariciones en cómics junto a otros superhéroes. De manera similar, en el ámbito académico, buscamos identificar a los investigadores más interconectados y comprender la afinidad entre ellos. Cada investigador se representa como un nodo en nuestra investigación, y los enlaces entre nodos representan la cantidad de artículos científicos que dos investigadores han publicado juntos. Esta representación nos permitirá obtener un análisis gráfico que revele cómo se agrupan y comportan estos investigadores en las redes académicas.

MATERIALES Y MÉTODOS

Se nos proporcionó una base de datos referente a los artículos científicos que ha publicado CULagos durante un periodo de tiempo determinado, para cada artículo se incluyen todos los autores establecidos en una columna, el ID de estos, el título de la publicación, año, etc. Lo que buscamos con este análisis de red de colaboraciones es identificar nombres similares que representen a una misma persona, mediante una generación semiautomática de un diccionario, que a partir de las similitudes de los nombres le permitan a un operador, decidir si el nombre formara parte del diccionario o no, cuando se encuentre dentro de un porcentaje establecido de similitud. Para esto lo primero que hacemos es leer la base de datos, al emplear el comando *readcell*, nos toma los datos adquiridos como celdas, por lo que no tendrán un tipo de formato de dato válido, por lo que deberemos convertir los datos al formato requerido, en este caso a *strings*, para reducir el costo computacional solo convertimos las columnas que nos son relevantes, en este caso sería los autores y el título del artículo, por lo que se le indicará al usuario que ingrese el número de columna en la que se encuentran los títulos, así como la columna correspondiente a los autores para dichos títulos, por lo que tras ser ingresados estos valores por el usuario,

almacenaremos los datos de estas columnas en una nueva variable la de tipo *string*, donde al almacenar los valores asignados dejarán de ser de tipo *cell*.

Con las columnas relevantes, se procede a sustituir todos los caracteres no deseados haciendo uso del comando *strrep*, tales como los acentos y algunos signos de puntuación. Para esto, es necesario calcular primero las dimensiones de la nueva matriz creada utilizando el comando *size*, donde el primer valor que nos brinde corresponderá al número de columnas, el cual emplearemos para realizar un recorrido en cada una de las filas, esto nos permite buscar en una cadena un carácter determinado y reemplazarlo por otro, obteniendo al final, una matriz limpia.

A partir de este proceso, procedemos a aislar los nombres en una nueva variable para poder procesarlos de una manera sencilla. Una vez con los nombres aislados en cada casilla, se encuentran múltiples nombres referentes a todos los colaboradores para un artículo determinado, por lo que para poder acceder al listado de nombre, es necesario que separemos estos para posteriormente hacer una lista; la cual usaremos para realizar los análisis. Motivo por el cual le preguntaremos al usuario en qué fila comienzan los nombres, esto debido a que en ocasiones podría haber bases de datos las cuales no inicien en la primera fila. A partir de la matriz que poseemos con los títulos y autores podremos crear una nueva matriz; en la cual, como se mencionó anteriormente, se encuentran múltiples nombres separados por comas, por lo que para separarlos bastará con emplear el comando *strsplit*, en la cual se crea una variable auxiliar que tomará los valores resultantes de aplicar el comando mencionado previamente. Al realizarse la acción, esta variable será un vector, donde cada posición corresponderá al nombre de cada uno de los investigadores que colaboraron para un determinado artículo; también se calcularán las dimensiones de esta variable, nuevamente con el comando *size* para que a través de un ciclo iterativo encargado de asignar cada una de las posiciones de este vector a una columna para la fila correspondiente al artículo, por lo que, al final de este proceso tendrá una matriz donde cada fila representa un artículo, y cada columna corresponde a cada uno de los autores que participaron en la elaboración de dicho artículo.

Teniendo los nombres separados por artículo, es necesaria la creación de una lista la cual contenga cada uno de los nombres, para posteriormente separarlos y realizar el análisis, por lo que primero creamos una variable

para almacenar la lista, y procedemos a realizar un barrido en la matriz obtenida en el paso anterior; analizaremos para cada fila todas sus columnas y se buscarán aquellas que no se encuentren vacías mediante el uso del comando *ismissing*. Al ser encontradas, se almacenará su información en una lista, de tal forma que al final tengamos una lista de todos los nombres que aparecen en la base de datos.

El siguiente paso es eliminar todos los nombres repetidos que se encuentren en la lista que se acaba de crear. Primero se cuestionará si la casilla que se encuentra analizando se encuentra vacía mediante el comando *ismissing*, en caso de no contar con un valor vacío tomará el valor almacenado y lo comparará con cada uno de los demás elementos de la lista, donde en caso de que sean exactamente iguales, eliminará el valor con el que se comparó asignando un valor vacío a esa casilla mediante el comando *missing*, dando como resultado al final una lista sin nombres repetidos.

Teniendo los nombres aislados y sin repetirse, el siguiente paso será separar cada uno de los nombres en sus palabras, por lo que generamos una variable encargada de tener los nombres separados de cada elemento de la lista creada previamente. Mediante un barrido de la lista, tomaremos cada uno de los nombres y haciendo uso del comando *strsplit* lo separaremos en sus partes almacenando una variable auxiliar. Una vez con el nombre separado, calcularemos las dimensiones de este empleando un segundo ciclo transferir cada uno de los fragmentos del nombre a nuestra variable *Mnombres*, donde almacenará los datos siempre que este no se encuentre vacío, por lo que al final tendremos una matriz en la cual se encuentran los nombres de nuestra lista separados en sus partes.

El siguiente paso será calcular el tamaño de la matriz que contiene los nombres separados en sus partes ya que buscamos ver cuál es el valor máximo de nombres que se poseen, el cual estará almacenado en la variable *tm*, en la posición de las columnas, para que, al momento de hacer la correlación, anote el porcentaje de similitud que tiene cada palabra de ese nombre con cada una de las palabras de los demás nombres. En la matriz estableceremos nuestra relación, y la manejaremos de tipo numérica almacenando únicamente los índices, y tendrá un número de filas igual al producto del número de filas que tiene la lista de los nombres separados por el número de columnas de ésta misma más dos, mientras que el número de columnas será igual a el tamaño de la lista de los nombres sin repetir.

Del mismo modo, para realizar el análisis emplearemos ciclos repetitivos, por lo que deberemos emplear una variable que con la actualización de los ciclos permita posicionar los datos de manera correcta. En este caso empleamos ; donde para la primera iteración comienza en el primer elemento de la casilla debido a que *i1* vale 0, y comenzará a posicionar los elementos en los lugares correspondientes, y al aumentar la iteración que en este caso es *i1* realizará lo mismo, pero ahora para la fila correspondiente al ciclo que se esté cursando.

Posteriormente desarrollamos el mecanismo de inferencia, por lo que iniciaremos un ciclo while, en el que cada iteración le corresponderá un nombre; para la palabra correspondiente a este ciclo la almacenará separada en sus palabras en una variable auxiliar, donde se calculará el número de palabras que esta tiene, y a partir del número obtenido se le asignará un porcentaje, para lo cual dividirá 100 entre el número de palabras que posee el nombre, por lo que a cada una de las palabras le asigna el valor resultante, del mismo modo mediante el comando *strlength* contaremos el número de caracteres que posee cada una de las palabras, asignándose en la posición correspondiente para cada una de las palabras.

Procederemos a crear una nueva variable auxiliar, donde se fragmentará cada una de las palabras. En este nuevo auxiliar se procederá a dejar tres filas para cada uno de los nombres, donde la primera fila de cada iteración corresponderá a las letras fragmentadas de cada uno de los nombres, la segunda corresponderá al porcentaje del nombre que le corresponde a la letra en cuestión y la tercera será un indicador sobre si ya se asignó este nombre anteriormente con el individuo que se está comparando. Para esto, necesitamos calcular las dimensiones del auxiliar de tal forma que logremos conocer el número de palabras y caracteres que tiene el nombre para así poder realizar el procedimiento mencionado anteriormente para cada una de las palabras del nombre, nuevamente mediante el comando *strlength*, a partir de aquí habrá dos posibles casos, el primero será cuando el nombre solo posea una sola letra, por lo que le asignaremos toda la ponderación de la palabra a esa letra en particular; el segundo caso se aplica cuando la palabra en cuestión tiene más de una letra, por lo que lo primero que se debe hacer es separar cada una de las letras a una posición en orden de la fila determinada en la variable que se acaba de crear. Una vez que asigna la letra en la iteración, lo siguiente es preguntarse si es la

primera letra del nombre, a esta letra se asignará el valor de un tercio del valor total de la palabra en la segunda fila en la columna correspondiente a la letra que se está analizando, en caso contrario le asignará un valor que resulta de la división del valor de la palabra entre tres, multiplicado por dos, que representan los dos tercios que aún se tienen sin emplear de la palabra, dividido entre el número de letras que tiene el nombre menos una, de tal forma que se reparte el sesenta y seis por ciento entre todas las letras de la palabra menos una.

Con la asignación de valores de la palabra de comparación para el ciclo —donde la palabra cambia con cada iteración— sabemos que debemos comparar este nombre con cada uno de los nombres que se encuentran en la lista, por lo que realizaremos un barrido de la matriz que contiene los nombres separados por palabras, si dentro del nombre completo que tenemos almacenado en el auxiliar —correspondiente a la iteración en la que se encuentra— hay contenida alguna de las palabras del nombre que se está comparando en la iteración principal —siempre que no se encuentre vacío— mediante el uso del comando *contains*, en caso de encontrar similitud, procederá a analizar con cuál de las palabras tiene las similitudes, por lo que se deberá hacer un recorrido de la variable auxiliar que tiene la ponderación de cada palabra, por lo que una vez que encuentre con que palabra tiene similitud, procederá a realizar el análisis, donde gracias a el ciclo que se empleó en el recorrido para ver con que palabra tiene similitud se podrá acceder directamente a los porcentajes y evaluaciones de dicha palabra, los cuales se encuentran almacenados en la variable previamente mencionada, por lo que empleamos el comando *extract*, para extraer las letras de forma ordenada en un vector del nombre con que se encontró similitud y procedemos a comparar letra a letra con el nombre de la iteración principal. Sabemos que al abreviar un nombre se emplean la primera o primeras letras, por lo que mediante un ciclo recorreremos comparando que las letras del nombre a comparar concuerden con las del nombre de la iteración principal, en caso de que ambas letras coincidan sumará a un contador el valor correspondiente a esa letra donde al terminar todas las letras de la palabra a comparar, si han estado en orden le asigna el valor del contador a la posición correspondiente de la matriz de similitudes, en caso de no iniciar ambas en la misma letra o no tener el mismo orden le borrara el porcentaje de similitud acumulado para

esa palabra almacenado en el contador, por lo que no asignará nada en la matriz de similitudes.

El siguiente paso será sumar los pesos calculados de cada letra y en una nueva variable almacenar el resultado de esa comparación en una posición específica para posteriormente analizar cada una de las demás palabras para ese nombre, donde al finalizar este segmento de código tendremos como resultado una matriz de “ $n*m$ ” en la cual, tendremos la similitud que tiene cada uno de los nombres con donde el valor que tenemos en la primera columna corresponde al nombre que se encuentra en la lista de nombres y el valor que se encuentra en cada múltiplo de ocho de cada columna —esto cambia dependiendo del valor máximo de nombres que tenga una sola persona más dos, lo cuales son para insertar el número de iteración y el porcentaje de similitud total—, será el nombre con el que se comparó.

Lo siguiente es formar nuestra matriz de etiquetas a partir del análisis realizado previamente, por lo que tenemos una matriz en la cual tenemos una relación de similitud de cada nombre con cada uno de los demás por lo que ahora construiremos una matriz a partir de los nombres que tuvieron una similitud en determinado margen, por lo que lo primero será tomar cada uno de los nombres de la lista y en las columnas subsecuentes poner los que tuvieron un porcentaje de similitud que sea superior a un 90 %.

Generamos una variable para almacenar las variaciones en los nombres pertenecientes a cada uno de los individuos, por lo que empleamos dos estructuras cíclicas, donde la primera será la que tome el nombre base, mientras que la siguiente será para recorrer todos los nombres a partir del seleccionado en busca de aquellos que cumplan con la condición para ser considerados etiqueta del nombre seleccionado en el primer ciclo repetitivo, en caso de que estén en el rango de similitud entre el 65 % y el 90 %, le preguntará al usuario mediante el comando *input*, si el nombre formará parte de las etiquetas, en caso de este resultara ser etiqueta, el usuario deberá digitar el número uno mediante el teclado para que permita almacenar este nombre como una etiqueta, dando como resultado una matriz donde la primera columna representa el nombre base, mientras que las columnas subsecuentes representan las diferentes formas en las que este autor podría aparecer mencionado en sus publicaciones.

Habiendo obtenido nuestras etiquetas preestablecidas, es necesario eliminar las etiquetas repetidas, donde aparezca como etiqueta secundaria el nombre de una etiqueta principal diferente, debido a que, al generar las variantes para cada etiqueta, las generamos inclusive para las etiquetas, por lo que nos enfocaremos en la eliminación de los nombres repetidos.

Utilizamos dos ciclos iterativos para recorrer las filas y columnas de los nombres principales durante la comparación. Una vez que seleccionamos una etiqueta, empezamos a buscar en todas las columnas a partir de la fila siguiente para encontrar aquellas en las que el nombre almacenado en la etiqueta sea exactamente el mismo. Cuando lo encontramos, lo eliminamos asignándole un valor “missing”. Si encontramos una etiqueta, esto indica que esa persona puede ser la misma; por lo tanto, revisamos nuevamente toda la fila para analizar si los nombres que contienen esa etiqueta ya están registrados, comparándolos uno por uno. Añadimos aquellos nombres que forman parte de la etiqueta principal que estamos comparando y los eliminamos de la etiqueta que estamos analizando. De esta manera, obtenemos las etiquetas de manera más completa, permitiendo vincular nombres que pueden no tener mucha similitud con el nombre principal pero aún forman parte de este.

Completado el paso anterior, nos encontraremos con la ausencia de varias etiquetas principales en nuestra matriz. Por consiguiente, será necesario realizar un recorrido para eliminar todas las filas que no contengan un nombre principal, identificado como el nombre en la primera columna de cada fila. Este proceso implica incrementar un contador cada vez que se elimina una fila. Posteriormente, en las filas restantes que no están vacías, se realizará un recorrido equivalente al número de filas eliminadas según el contador, lo que resultará en una matriz de etiquetas sin huecos.

Ahora que contamos con una etiqueta principal para cada variante de nombre de los individuos, el siguiente paso consiste en sustituir todas las variantes de cada nombre en la base de datos principal por su etiqueta principal. Para lograr esto, utilizaremos 3 ciclos iterativos. El primero recorrerá cada fila de la columna “autores”, mientras que los dos siguientes realizarán un barrido en la matriz de etiquetas. Utilizando el comando *contains*, verificaremos si alguna de las variantes de los nombres está contenida en la etiqueta principal. En caso afirmativo, sustituiremos ese nombre por la etiqueta correspondiente

El siguiente paso consiste en crear una matriz para establecer las relaciones entre los individuos. Para lograr esto, asignamos el nombre principal de cada individuo en la primera fila a partir de la segunda columna, y en la primera columna a partir de la segunda fila. Una vez completado este paso, procedemos a realizar un barrido para cada nombre que figura como etiqueta principal en la matriz de etiquetas. Mediante un segundo ciclo, verificamos utilizando el comando *contains* si el nombre correspondiente a la iteración está presente en el artículo científico. Si se encuentra, asignamos el título del artículo en la casilla correspondiente de la matriz de relaciones. Si un individuo tiene relación con más de un artículo, se separan los títulos por un punto y coma. Para esto, verificamos si el individuo ya tiene artículos asociados en la casilla actual. En caso afirmativo, almacenamos el string y lo concatenamos con un ‘;’ utilizando el comando *strcat*, para luego unirlo con el nuevo título encontrado. Como resultado, obtenemos una matriz que muestra las relaciones de cada autor con los demás autores incluidos en la base de datos.

El siguiente paso será establecer una lista de nodos, mediante un ciclo iterativo le asignamos a una variable en la primera columna el número de la iteración y en la segunda columna el nombre que corresponde como etiqueta principal de la matriz de etiquetas. Lo siguiente que se realizó fue convertir la matriz de adyacencia. De contener los títulos, pasó a contener únicamente el número de artículos que tiene un autor con otro, donde buscará las casillas que contengan valores. Anteriormente al concatenar los nombres de los artículos que tenían los autores en común se les asignó un “;”. Para determinar el número de artículos que tienen en común, basta con contar el número de veces que aparece el “;” en las casillas, para así obtener la matriz de adyacencia ponderada empleando el comando *count*.

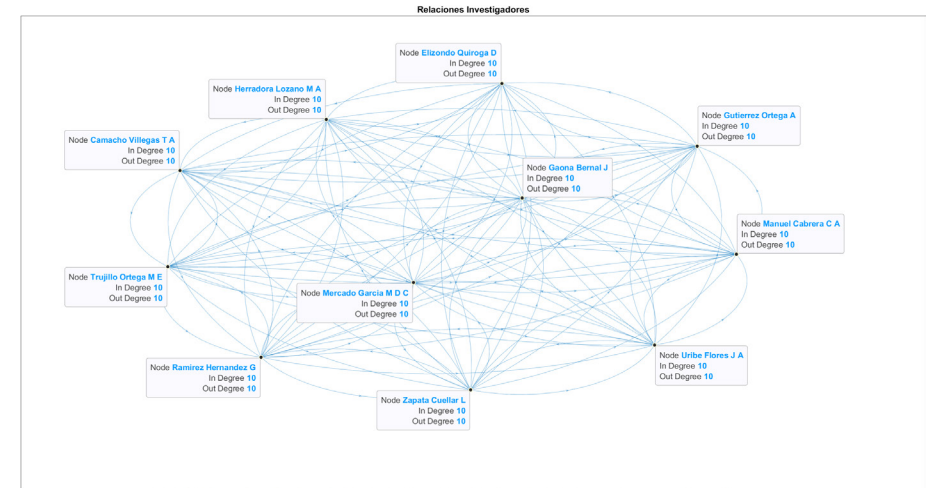
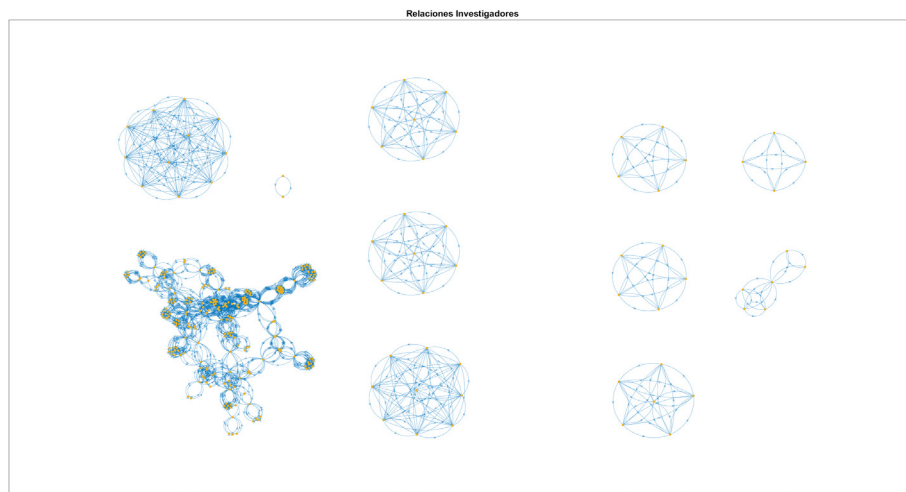
Lo siguiente es tomar con qué autores está relacionado cada autor, por lo que, a partir de la matriz obtenida en el bloque de código previo, realizaremos un barrido en esta, donde “a” servirá para guiar las filas y “b” guiará las columnas. De las secciones establecidas de la matriz buscaremos las columnas que contengan información empleando la función *ismissing*, la cual nos entregará un 1 al estar vacío y un cero al contener información podremos saber si una columna se encuentra vacía, una vez con la casilla con información localizada guardaremos su índice para saber con quién tiene relación, dando como resultado una matriz a la que denominamos

“MN” donde cada fila representa una persona, y los números en sus columnas representan el índice de las personas con quien tiene relación o ha publicado artículos científicos.

El siguiente paso es crear una tabla ponderada de relaciones a partir de la matriz “MN” creada previamente, en la cual las primeras dos columnas representarán a los individuos, la tercera columna el número de artículos que tienen en común y la cuarta columna el porcentaje de artículos que tiene este autor con esta persona sobre el total de artículos que tiene registrados en la base de datos. Dando como resultado una matriz de ejes ponderados, entre cada uno de los individuos. En el código se aprecia que se realiza el proceso dos veces, y se almacena en diferentes variables debido a que se creó uno que contenía los nombres textualmente y un segundo en el cual se dirigía a los nombres mediante el número de identificación del nodo.

El siguiente paso es establecer los ejes del grafo, por lo que tomamos la variable creada previamente en la que tenemos las relaciones de los autores y creamos un vector para cada una de las columnas que teníamos previamente creadas para proceder a crear el grafo, a partir de los parámetros creados en el segmento de código previo, mediante el comando *digraph(x,y)*, la cual nos crea un grafo direccionado, y finalizamos graficando el grafo.

RESULTADOS



CONCLUSIONES

Se diseñó un agente especializado para procesar el lenguaje natural, mediante el cual se logró limpiar una base de datos de caracteres no permitidos y acentos. Del mismo modo se logró crear una métrica para la advertencia de perfiles similares dentro de los nombres pertenecientes a la base de datos, asimismo, se lograron definir etiquetas para cada uno de los autores pertenecientes a esta base de datos para posteriormente generar una matriz de colaboración con la que posteriormente se generó una representación gráfica, para permitirle al usuario la visualización de los datos.

REFERENCIAS

América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/strsplit.html>
 Buscar y reemplazar subcadenas - MATLAB strrep - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/strrep.html>
 Concatenar cadenas horizontalmente - MATLAB strcat - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/strcat.html>
 Concatenar cadenas horizontalmente - MATLAB strcat - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/strcat.html>
 Create cell array from file - MATLAB readcell - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/readcell.html>

Create missing values - MATLAB missing - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/missing.html>

Determinar si un patrón está en cadenas - MATLAB contains - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/string.contains.html>

Extraer subcadenas de cadenas - MATLAB extract - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/extract.html>

Find missing values - MATLAB ismissing - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ismissing.html>

Graph with directed edges - MATLAB - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/digraph.html>

Lengths of strings - MATLAB strlen - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/strlen.html>

Solicitar una entrada al usuario - MATLAB input - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/input.html>

Split string or character vector at specified delimiter - MATLAB strsplit - MathWorks

Tamaño de un arreglo - MATLAB size - MathWorks América Latina. (s. f.). <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/size.html>

Aprovechamiento de los residuos finos de poliestireno expandido para su aplicación como adsorbente de fármacos de uso común

STEPHANIA YARETH ESTRADA ALCARÁZ
stephania.estrada8204@alumnos.udg.mx

DAFNE LIZBETH ROMO CORTEZ
dafne.romo6635@alumnos.udg.mx

EGLA YARETH BIVIÁN CASTRO
egla.bivian@academicos.udg.mx

RESUMEN

Con el incremento de la población y la contaminación ambiental, la necesidad de agua limpia será tema de las próximas décadas. Una demanda específica a nivel global es la remoción efectiva de los contaminantes del agua con la finalidad de asegurar su calidad.

Gran variedad de tratamientos tecnológicos para la remoción de contaminantes de las fuentes de aguas naturales, la adsorción es considerada una de las más prometedoras debido a su simplicidad y bajo costo. Por lo que, el material sorbente que se use en el proceso de adsorción es clave para lograr el objetivo de la técnica. En este proyecto se pretende aprovechar un desecho polimérico, el poliestireno expandido (EPS) o unicel como adsorbente de fármacos de uso común. El poliestireno expandido es un material de aislamiento bien establecido que tiene varios usos, principalmente el de aislante por su espuma ligera y rígida con una alta resistencia al impacto. Además, posee una alta capacidad de carga con bajo peso, barrera absoluta de agua y vapor y larga vida útil. Este plástico celular liviano que consta de pequeñas partículas de forma esférica contiene aproximadamente un 98 % de aire. Este material es conocido comúnmente como unicel, cuyo uso excesivo representa un importante impacto ambiental. Por otro lado, fármacos como las fluoroquinolonas que son un grupo de agentes antibacterianos sintéticos

usados tanto en la medicina humana como veterinaria para el tratamiento de enfermedades infecciosas, cuyo uso ha derivado en un fuerte impacto ambiental al encontrarse residuos de estos en las aguas naturales, por lo que su remoción es muy deseable.

PALABRAS CLAVE

Poliestireno expandido (expanded polystyrene), Adsorbente (sorbent), Enrofloxacin (enrofloxacin), Contaminación ambiental (environmental pollution), Agua contaminada (contaminated water)

INTRODUCCIÓN

Se define al poliestireno como un polímero termoplástico de cadena lineal, estructuralmente formado por 1900 a 2900 unidades de estireno, por lo tanto es un polímero vinílico que surge de la polimerización del monómero de estireno por radicales libres. Es ampliamente utilizado en distintos aspectos para consumo humano debido a sus características de bajo costo, peso ligero, facilidad de fabricación, resistencia a la humedad, para procesos de aislamiento térmico, protección sanitaria, transporte y almacenamiento de productos [2, 3]. El poliestireno expandido, conocido comúnmente como Unicel, es un material químicamente inerte no biodegradable, es decir, que no se descompone, no se desintegra y que no desaparece en el medio ambiente, no puede contaminar químicamente el suelo, el agua o el aire. Sin embargo, puede ser un problema ambiental si no se reciclan por su gran resistencia, por lo que se considera como el material eterno. Algunas investigaciones sugieren que su ciclo de vida es alrededor de 500 a 1000 años.

El material es acumulativo, por lo que su eliminación representa un problema de grandes dimensiones, especialmente cuando se habla de su contención y destino final. Además, el reciclaje de PS es actualmente costoso y bastante limitado, particularmente en algunos países en desarrollo, lo que conduce a una grave "contaminación blanca". En la actualidad, se han visto billones de fragmentos de plástico flotando en el mar, pero estos solo representan entre el 1 y el 2 % de los que llegan al océano al año, incluyendo residuos poliméricos como el Unicel, que aportan 2,000 millones de toneladas de dióxido de carbono, que genera gran impacto en la atmósfera por las emisiones de gases de efecto invernadero.

Uno de los desafíos más importantes es la contaminación del agua debido a la falta de tratamiento adecuado de las aguas residuales que afecta gravemente la calidad, la vida acuática y la salud pública. Entre sus contaminantes, los residuos de enrofloxacin representan un tipo de contaminante peligroso muy extendido en los ecosistemas acuáticos que provoca efectos tóxicos. La enrofloxacin es un fluoroquinolona, un grupo de agentes antibacterianos sintéticos usados en medicina tanto humana como veterinaria que se caracteriza por una muy buena actividad antimicrobiana. Sin embargo, la enrofloxacin no es capaz de absorberse después de la ingestión, por lo que una gran cantidad de este fármaco ha ingresado a las aguas superficiales, incluso en el agua potable.

El desarrollo de sorbentes de alto rendimiento es crucial para la viabilidad de aplicar la sorción en la limpieza del agua. Hasta ahora se han descrito numerosos sorbentes, como carbonos, óxidos, nitruros y polímeros. Este trabajo consiste en el aprovechamiento de residuos de poliestireno expandido para adsorber fármacos como la enrofloxacin y que se encuentren en las aguas naturales. Por lo que se utilizaron dos tipos de poliestireno tanto el residual así como el grado reactivo que fueron los principales productos para la comparación y realización del proyecto ya que el proceso de preparación es simple y no requiere instrumentos sofisticados ni procesos de fabricación complicados.

MATERIALES Y MÉTODOS

Los materiales empleados en el experimento fue el poliestireno grado reactivo (PS35,000) (Sigma Aldrich) y poliestireno de residuos finos (PSrf) (Poliespuma, S.A. de C.V.), que fueron expuestos a sulfonación con ácido sulfúrico 98 % (Fermont). Los solventes utilizados como agua destilada, etanol, metanol, acetona, cloroformo, dimetilmetilsulfoxido (DMSO), dimetilformamida (DMF), acetonitrilo fueron de grado analítico y usados sin purificación previa.

Los equipos utilizados fueron: Espectrofotómetro UV-Vis Jenway modelo 7305 a una $\lambda = 277 \text{ nm}$, y un espectrofotómetro Agilent en la región de 190 – 1100 nm, usando celdas de cuarzo. Para los análisis de espectroscopia infrarroja se realizó de $4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$ en un equipo Perkin Elmer modelo RXI con un accesorio HATR. El fusiómetro fue marca Prendo. El ajuste de pH se llevó a cabo en un equipo Conductronic PC45.

Los residuos finos de poliestirenos expandido (PS_{erf}) se lavaron previamente de la siguiente manera: en un matraz de fondo redondo se pesaron 2 g de PS_{erf} y se adicionaron 80 ml de etanol, se mantuvo en agitación constante durante 1 h y se dejó secar en estufa a 60° C por 12 h. Para las pruebas de solubilidad se colocó 1 mg de PS_{erf} y PS 35,000 en diferentes tubos de ensayo y se adicionó a cada uno 1 ml de los siguientes disolventes: agua, metanol, etanol, acetona, cloroformo, DMF, DMSO y acetonitrilo.

SULFONACIÓN DEL POLIESTIRENO

En un matraz de fondo redondo se pesaron 1 g de PS_{erf} y PS 35,000 (previamente purificado) y se adicionaron 20 ml de ácido sulfúrico. El sistema se mantiene dentro de la campana de extracción y con agitación constante por 3 h en baño maría a 50° C. Se decanta para remover el ácido y se recupera para su uso en los siguientes experimentos. El material sulfonado se lava con agua destilada hasta neutralizar su pH y se somete a 60 °C secado en la estufa para su siguiente experimento. Este proceso de sulfonación se repitió variando el tiempo de sulfonación en 6, 9 y 24 h.

PRUEBAS DE REMOCIÓN

Buffer de fosfatos. Para la solución alcalina, se disuelven 9.5 g de sal fosfato sódico dibásico en 5 ml cantidad de agua destilada. Una vez disuelta agregar agua destilada hasta completar 1000 ml. Para la solución ácida, disolver 9.2 de sal fosfato sódico monobásico en 5 ml cantidad de agua destilada. Una vez disuelta agregar agua hasta completar 1000 ml. Mezclar bien e identificar. La sal se puede sustituir por fosfato potásico. El buffer se prepara a partir de la solución alcalina (30 ml) y ácida (20 ml), que son mezcladas y aforadas a 500 ml con agua destilada, el pH de 7.0 - 7.2.

El principio activo de enrofloxacin se obtuvo a partir de comprimidos adquiridos de forma comercial y se extrae mediante un sistema Soxhlet. Con el principio activo puro se prepara una solución Stock 10 mg/ml (10 ml) en buffer fosfato 100 mM, pH = 7.4. Se realiza la curva patrón de enrofloxacin preparando por triplicado en matraces aforados de 5 ml las diluciones. La ecuación correspondiente a la curva patrón fue.

LA SOLUCIÓN CONTAMINADA CON ENROFLOXACINA

Se prepara la solución contaminada en 1 matraz de 100 ml, con 10 µl de la solución stock de enrofloxacin cada uno, se afora con buffer previamente preparado. Siendo la concentración de 10 µg/ml (C_0).

PRUEBAS DE ADSORCIÓN POR TRIPLICADO, PARA REMOCIÓN DE ENROFLOXACINA

En un matraz de fondo redondo se pesaron 100 mg de PS sulfonado (el adsorbente), se vierte la solución contaminada con enrofloxacin, esta mezcla se mantiene en agitación constante a 180 rpm, y a una temperatura de 25° C. Se toman alícuotas de 3 ml en periodos diferentes de tiempo: 0, 15, 30, 45, 90, 120, 240, 300 y 1230 min. Las diferentes muestras se centrifugaron y separaron con cuidado el líquido del sólido. Se midió la absorbancia a una $\lambda = 277$ nm de cada uno de los líquidos hasta que el dato de la absorbancia fue constante. Se graficó en Excel los datos resultantes, repitiendo el mismo proceso con las tres muestras, para cada uno de los grupos 3, 6 y 9 h. Al final, los sólidos de cada una de las muestras se someten a pruebas de fusión y solubilidad, así como en un espectro infrarrojo y se comparan los resultados obtenidos. La capacidad de adsorción se calculó mediante la siguiente fórmula (Bivián-Castro et al., 2023):

$$q_t = (C_0 - C_f) \times V/W$$

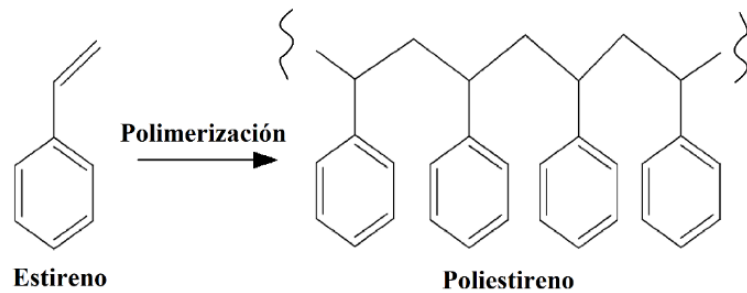
Donde la q_t es la capacidad de adsorción en el tiempo t , C_0 es la concentración inicial, C_f es la concentración final, V es el volumen y W es la masa de adsorbente.

RESULTADOS

CARACTERÍSTICAS DEL POLIESTIRENO

La transformación del doble enlace del carbono - carbono del estireno en enlaces simples para convertirse en poliestireno se muestra en la Figura 1:

Figura 1. Reacción química para la formación del poliestireno a partir de la polimerización del estireno



El punto de fusión del unicel es de 70 – 115° C y el de PS35,000 es de 150 - 247° C y son insolubles en agua. Es resistente a los ácidos débiles y media a los ácidos fuertes, pero tiene baja resistencia a los disolventes orgánicos. En la tabla 1 se presentan los resultados, resaltados en negrita y cursiva para marcar la diferencia de temperatura y el grado de solubilidad que presentan los poliestirenos.

Tabla 1. Punto de Fusión y solubilidad para el poliestireno 35,000 y poliestireno residuos finos

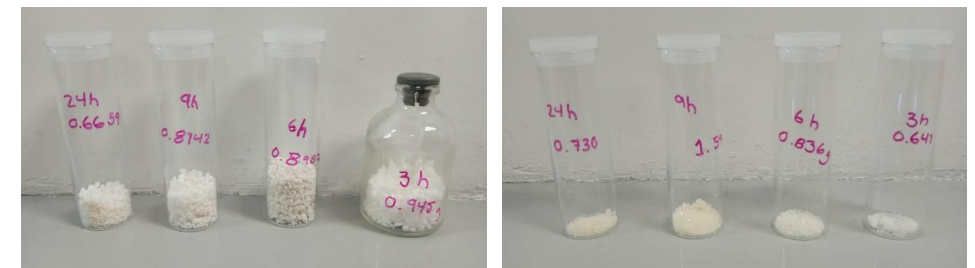
PS	W (mg)	T _i (°C)	T _f (°C)	ΔT	H ₂ O	MetOH	EtOH	C ₃ H ₆ O	CHCl ₃	DMF	DMSO	C ₂ H ₃ N
35,000	10.3	50	68	18	NS	NS	NS	PS	MS	NS	NS	NS
rf	10.2	68	117	49	NS	NS	NS	PS	MS	NS	NS	NS

*NS no soluble, PS parcialmente soluble, MS muy soluble

Bajo la campana de extracción se colocó el material para el proceso de sulfonación. En el periodo de 6 h el PS35,000 se logra homogeneizar, mientras que el PSrf queda suspendido en la superficie del ácido. Para las 9 h el poliestireno de residuos finos se torna turbio y parte del producto comienza a quemarse. En el periodo de 24 h ambos poliestirenos lograron una consistencia turbia pero el PSrf sigue heterogéneo. Cada uno de los materiales sulfonados requirió una serie de lavados, en promedio se realizaron 10 lavados para el poliestireno de grado reactivo y 15 para el de

residuos finos para poder lograr un pH neutro. Enseguida cada material se secó en la estufa. Los materiales obtenidos del proceso de sulfonación del poliestireno son los que se pueden observar en las imágenes de la figura 2.

Figura 2. Sulfonación a las 3, 6, 9 y 24 h para el poliestireno expandido grado residuos finos (a) y el poliestireno 35,000 (b)



(a)

(b)

Después de la sulfonación se registraron los datos de fusión y solubilidad representados en la tabla 2, los que pueden ser comparados con los resultados de la tabla 1. Los materiales sulfonados (PSS35,000 y PSSrf) mostraron ser solubles y parcialmente solubles en cloroformo respectivamente. La temperatura de fusión para el PSS 35,000 fue de 55 – 74° C y para el PSSrf de 62 – 117° C.

Tabla 2. Prueba de Fusión y Solubilidad con el PS sulfonado

	h	w (mg)	T _i °C	T _f °C	Δ T	H ₂ O	Me-tOH	EtOH	C ₃ H ₆ O	CHCl ₃	DMF	DMSO	C ₂ H ₃ N
PSS 35,000	3	19.0	60	70	10	NS	NS	NS	NS	S	NS	NS	NS
	6	11.8	55	74	19	NS	NS	NS	NS	S	NS	NS	NS
	9	12.5	53	80	27	NS	NS	NS	NS	S	NS	NS	NS
	24	13.0	54	76	22	NS	NS	NS	NS	S	NS	NS	NS
PSSrf	3	10.0	58	89	31	NS	NS	NS	PS	PS	NS	NS	NS
	6	11.8	62	115	53	NS	NS	NS	PS	PS	NS	NS	NS
	9	13.2	65	117	52	NS	NS	NS	PS	PS	NS	NS	NS
	24	14.7	65	98	33	NS	NS	NS	PS	PS	NS	NS	NS

*NS no soluble, PS parcialmente soluble, S soluble

REMOCIÓN DE LA ENROFLOXACINA

Para la remoción de enrofloxacin se usaron los sorbentes de poliestireno sulfonado de 3, 6 y 9 h. Por otro lado, no todas las pruebas resultaron eficientes, el de 3 h la adsorción fue deficiente, no hubo ningún cambio. El de 9 h tuvo una ligera diferencia al de 3 h, pero no se obtuvieron los datos deseados, el que tuvo mejor resultado fue el de 6 h. En la tabla 3, se registran los resultados obtenidos en la absorción de la enrofloxacin cuando se aplicó como sorbente el poliestireno grado reactivo sulfonado por 6 h (PSS35,000-6h). Se tomó la muestra por triplicado (A, B, C de la tabla 3) en cada periodo y se centrifugo para quitar los restos del sorbente.

Tabla 3. Resultados de la prueba de remoción de enrofloxacin usando PSS35,000 6 horas

Tiempo (min)	Absorbancia ($\lambda = 277 \text{ nm}$)			Absorbancia Promedio	Cf ($\mu\text{g/ml}$)	Qt (mg/g)
	(A)	(C)	(B)			
0	0.759	0.747	0.741	0.749	7.77	2.16
15	0.819	0.83	0.83	0.826	8.58	1.38
30	0.846	0.814	0.846	0.835	8.67	1.29
45	0.817	0.806	0.828	0.817	8.48	1.47
60	0.776	0.772	0.786	0.778	8.08	1.87
90	0.753	0.707	0.754	0.738	7.66	2.27
120	0.741	0.739	0.723	0.734	7.62	2.31
240	0.738	0.728	0.549	0.672	6.97	2.94
300	0.753	0.747	0.717	0.739	7.67	2.26
1230	0.817	0.796	0.796	0.803	8.34	1.62

El poliestireno de grado reactivo sulfonado por 6 h, mostró ser un sorbente favorable para la remoción del fármaco, siendo efectivo desde el tiempo 0 min. Pero no sería la primera opción para utilizarlo. En el caso del PSSrf se utilizaron para la remoción sólo el de 3, 6 y 9 h, los resultados obtenidos con el sorbente sulfonado por 3 h mostró una capacidad de remoción al tiempo 0 min de qt 5.03 mg/g, siendo más eficiente que el de PSSrf de 9 h con un qt 1.8 mg/g. En la tabla 5 se muestran los resultados obtenidos para el PSSrf de 6 h ya que fue el que resultó ser mucho más adsorbente que incluso el del PSS35,000, teniendo desde el tiempo 0 min una capacidad de adsorción de qt 5.25 mg/g.

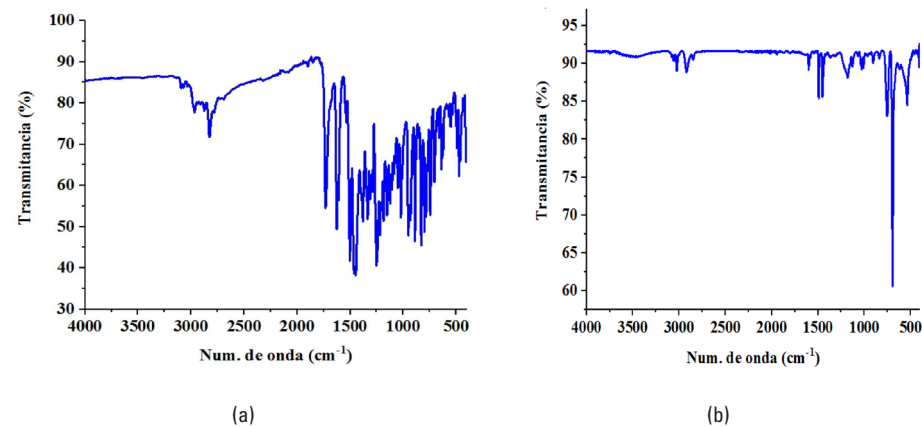
Tabla 4. Resultados de la prueba de remoción de enrofloxacin usando PSSrf 6 horas

Tiempo (min)	Absorbancia ($\lambda = 277 \text{ nm}$)			Absorbancia Promedio	Cf ($\mu\text{g/ml}$)	Qt (mg/g)
	(A)	(C)	(B)			
0	0.441	0.447	0.442	0.443	4.59	5.25
15	0.434	0.429	0.429	0.431	4.46	5.38
30	0.523	0.503	0.503	0.510	5.28	4.58
45	0.498	0.510	0.509	0.506	5.24	4.62
60	0.473	0.484	0.471	0.476	4.93	4.92
90	0.405	0.405	0.406	0.405	4.19	5.64
120	0.407	0.407	0.420	0.411	4.26	5.58
240	0.392	0.392	0.392	0.392	4.05	5.77
300	0.389	0.389	0.389	0.389	4.02	5.80
1230	0.368	0.376	0.365	0.370	3.82	6.00

Resultados de espectroscopia infrarroja del sorbente poliestireno residuos finos 6 h en la remoción de enrofloxacin

En el espectro infrarrojo se observa el resultado de la interacción entre la radiación infrarroja y la muestra a analizar. Todos los valores están representados en intervalos, ya sea en número de onda (cm^{-1}) o de longitud de onda (nanómetros). Mientras que en el eje de las ordenadas (o de las Y) están representados los valores de la intensidad de absorción o transmisión. Cada pico en un espectro de infrarrojo representa un específico tipo de vibración. La región del espectro está situada entre 4,000 y 400 cm^{-1} , que es de gran utilidad para la identificación de la mayoría de los grupos funcionales presentes en las moléculas orgánicas. Las absorciones que aparecen en esta zona, provienen fundamentalmente de las vibraciones. En la figura 3 se muestra el espectro de infrarrojo medio correspondiente al fármaco, la enrofloxacin que presenta gran cantidad de vibraciones situadas en 1,500- 500 cm^{-1} que es a lo que se le llama huella digital y que corresponden a los grupos funcionales esperados para la molécula de enrofloxacin. También se incluye el espectro de infrarrojo del sorbente PSSrf 6 h después de la remoción de enrofloxacin durante 1230 min en el que se observaron señales que corresponden tanto al poliestireno sulfonado como al contaminante adsorbido.

Figura 3. Espectroscopia de infrarrojo medio de (a) enrofloxacin y (b) PSSrf-6 h recuperados después de la remoción de enrofloxacin al tiempo 1230 min.



CONCLUSIONES

Se logró obtener un resultado efectivo en la implementación de un polímero como el Poliestireno de residuos finos para adsorción de un fármaco como la enrofloxacin, que es de uso común en veterinaria. El sorbente PSSrf se observó que tuvo una estructura porosa autónoma, lo que puede facilitar los procesos de separación y regeneración, lo cual es muy favorable para aplicaciones prácticas. El PSS_{35,000} se obtuvo con una estructura cristalina haciendo más difícil la remoción de enrofloxacin. Los resultados de infrarrojo a que se sometieron los productos finales son de ayuda para verificar los puntos de mayor absorbancia de nuestro poliestireno y la exposición que aún tiene de enrofloxacin en nuestra agua restante. Sin embargo, el poliestireno de grado reactivo es más puro en consideración con el poliestireno de residuos finos, pues este ha resultado ser mejor absorbente, resultando la capacidad de adsorción para el PSS_{35,000}-6 h qt 2.16 mg/g en comparación con el PSSrf-6 h qt 5.25 mg/g.

REFERENCIAS

Arthuz, L. y Pérez, W. (2019). Alternativas de bajo impacto ambiental para el reciclaje del poliestireno expandido a nivel mundial. *Informador Técnico*, 83(2), 209–219. <https://doi.org/10.23850/22565035.1638>

- Bivián, E. Y., Zepeda, A., Guzmán, J. L., Flores, M. y Mata, B. (2023). Ion-imprinted polymer structurally preorganized using a phenanthroline-divinylbenzoate complex with the Cu (II) ion as template and some adsorption results. *Polymers*, 15(5), 1186.
- Chatterjee G. y Prasad S. (2011). Polystyrene: Properties and its applications in sensing platforms. En Gray J. (Ed.). *Materials Science and Technologies: Polystyrene: Properties, Performance and Applications*, (123-124) Hauppauge. Nova.
- Ho, B. T., Roberts, T. K. y Lucas, S. (2018). An overview on biodegradation of polystyrene and modified polystyrene: the microbial approach. *Critical reviews in biotechnology*, 38(2), 308–320. <https://doi.org/10.1080/07388551.2017.1355293>
- López, C. M. y Cánepa, J. R. L. (2013). Poliestireno expandido (EPS) y su problemática ambiental. *Kuxulkab'*, 19(36). <https://doi.org/10.19136/kuxulkab.a19n36.339>
- Poliestireno CME Materials*. (s. f.). Universidad de Barcelona. <http://www.ub.edu/cmematerials/es/content/poliestireno>
- Portocarrero, F. (2021). Biodegradación de poliestireno con tenebrio molitor para la sostenibilidad de empresas [Universidad Peruana Cayetano Heredia]. <https://hdl.handle.net/20.500.12866/9025>
- Rebouças, C. T., Kogawa, Kogawa, A. C. y Salgado, H. R. N. (2018). A new green method for the quantitative analysis of enrofloxacin by fourier-transform infrared spectroscopy. *Journal of AOAC International*, 101(6), 2001-2005. <https://doi.org/10.5740/jaoacint.17-0431>
- Varela, R. F., Rentería, L. B. y Gemma, J. (2020). Deterioro ambiental: una investigación sobre el consumo excesivo de recipientes de un solo uso (unicel) en la Universidad de Sonora. *Revista Vértice Universitario*, 22(86) <https://doi.org/10.36792/rvu.vi86.21>
- X. L., Xu, Y. C., Tan, X. Y., Lv, W. H., Zhang, D. G., He, Y. y Luo, Z. (2023). Enrofloxacin (ENR) exposure induces lipotoxicity by promoting mitochondrial fragmentation via dephosphorylation of DRP1 at S627 site. *Chemosphere*, 340, 139892. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.139892>
- Ye, C., Pan, Z. y Shen, Y. (2022). Facile conversion of polystyrene waste into an efficient sorbent for water purification. *Polymers*, 14(21), 4477. <https://doi.org/10.3390/polym14214477>
- Zhu, L., Zhao, S., Bittar, T. B., Stubbins, A. y Li, D. (2020). Photochemical dissolution of buoyant microplastics to dissolved organic carbon: Rates and microbial impacts. *Journal of hazardous materials*, 383, 121065. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.121065>

Densificación de materiales compósitos de una matriz de poliestireno con arreglos metal-orgánicos

LUIS GABRIEL GUTIÉRREZ VERA
lgrabriel.gutierrez@alumnos.udg.mx

EGLA YARETH BIVIÁN CASTRO
egla.bivian@academicos.udg.mx

RESUMEN

En este proyecto se presenta la densificación de materiales compósitos a base de un compuesto de tipo metal-orgánico (MOF) con cobre el cual fue insertado en un matriz de poliestireno proveniente de los residuos finos de poliestireno expandido en búsqueda de su aprovechamiento. Para la preparación del relleno, el MOF, previamente se prepara utilizando como precursor un compuesto a base de sulfato de cobre y el ligante 2-picolinamina. Por otro lado, la matriz de poliestireno se adecuó previamente usando como aditivo el ácido acético, esto con la finalidad de facilitar la inserción del MOF en la matriz. Para la densificación del material compósito se consideró la forma de un pellet como la más conveniente.

PALABRAS CLAVE

Poliestireno (polystyrene), densificación (densification), materiales compósitos (composites materials), arreglos metal-orgánicos (metal-organic frameworks), cobre (copper).

INTRODUCCIÓN

En las últimas dos décadas, los arreglos metal-orgánicos (MOFs) han mostrado tener potenciales aplicaciones en el almacenamiento y separación de gases, catálisis, purificación de agua, biomedicina y óptica. Lo anterior se debe a que este tipo de materiales poseen una gran área superficial, volúmenes de poros relativamente grandes, diversidad estructural y su superficie puede controlarse químicamente (Huang, 2023). Los MOFs son

una clase de redes de coordinación porosas y cristalinas compuestas por nodos metálicos inorgánicos que están conectados por ligandos orgánicos. Debido a la gran variedad de estructuras posibles, mediante la combinación de metales y ligantes, y las posibilidades de diseño resultantes, los MOFs suelen obtenerse en forma de polvos microcristalinos, lo que limita su manejo. Para aplicaciones realistas, los MOFs tendrían que ser moldeados en monolitos, películas, membranas, etc. y ser procesados como materiales compuestos en una matriz mediante la adición de polímeros, aglutinantes entre otros. La matriz de aditivos debe elegirse de acuerdo con la aplicación prevista. Un requisito previo general para cualquier matriz debe ser conservar la porosidad del MOF y el acceso a sus poros, lo que no necesariamente está garantizado con polímeros orgánicos (Spieß, 2022). El material compuesto se constituye por una matriz que se encuentra en mayor proporción y que combina sus propiedades con un material de relleno que es normalmente un sólido cristalino o amorfo y puede ser un compuesto químico estequiométrico o no estequiométrico. La densificación es un método que se utiliza para dar forma a los materiales de tipo polvo usando la presión mecánica. Los polvos del material se colocan en moldes y entonces una cierta presión se aplica para reducir los huecos entre las partículas del material y así formar bloques e incrementar de esta manera la estabilidad del material y obtenerlo densificado (Yu, 2023). Se han usado numerosas técnicas de conformado para producir MOFs en forma de gránulos, pellets y esponjas. Sin embargo, la pérdida del área superficial y la porosidad durante la densificación (entre el 14 % y el 64 %) en comparación con los polvos sigue siendo un problema importante en la implementación de MOF en la industria (Çamur, 2023). Los MOFs que contienen cobre (Cu-MOFs) son reconocidos por su alta actividad catalítica, la facilidad de síntesis la cual es viable por la abundancia natural de cobre. Los catalizadores que contienen cobre promueven la activación de materiales de partida con alta selectividad permitiendo así que se lleven a cabo los diferentes pasos de la reacción química (Singh, 2023). Los arreglos metal-orgánicos (MOF) y los polímeros de coordinación porosos (PCP) han recibido gran atención no solo por sus diversas topologías estructurales, sino también por sus diversas propiedades y aplicaciones útiles. La conjugación de los MOF con otros materiales, como sílice, poliestireno, partículas magnéticas y partículas de metales nobles, son una estrategia para producir materiales

funcionales a base de MOF (Choi, 2016). Estas estructuras también son materiales cristalinos porosos bidimensionales o tridimensionales con redes infinitas sintetizadas a partir de unidades de construcción secundarias (SBU), sales o grupos de cationes metálicos y ligandos orgánicos polidentados con conexiones de tipo coordinación. Estas propiedades confieren a los MOF un enorme potencial de aplicación en los que es importante la discriminación de moléculas mediante adsorción preferencial o tamizado molecular, por ejemplo, la administración de fármacos, la catálisis y la separación de gases (Wang, 2019). Los MOF se pueden utilizar como un sistema de administración de fármacos para resolver problemas tales como la resistencia de los hongos a los fármacos y la toxicidad de un fármaco para las células humanas normales (Yang, 2022). Este proyecto aporta una perspectiva más amplia de las formas en que un material compuesto a base de cobre puede densificarse, así como un mejor entendimiento de algunas de las propiedades del MOF de relleno.

MATERIALES Y MÉTODOS

MATERIALES Y REACTIVOS

Los reactivos utilizados en este proyecto fueron adquiridos de forma comercial y son $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (Karal, S.A. de C.V.), 2-picolilamina (Sigma-Aldrich), ácido tereftálico (Sigma-Aldrich), poliestireno expandido residuos finos (Poli-espuma, S.A. de C.V.), trietilamina (Sigma-Aldrich). Los solventes utilizados fueron de grado analítico.

EQUIPOS UTILIZADOS

Los espectros infrarrojos fueron realizados en un equipo Perkin Elmer modelo RXI en la región del medio infrarrojo en un accesorio HATR. Los estudios de punto de fusión se hicieron en un fusiómetro Prendo.

PREPARACIÓN DE LOS MATERIALES COMPOSITOS

Los residuos finos de poliestirenos expandido (PSErf) se lavaron previamente de la siguiente manera: en un matraz de fondo redondo se pesaron 2 g de PSErf y se adicionaron 80 ml de etanol; se mantuvo en agitación constante durante 1 h y se dejó secar en estufa a 60 °C por 12 h. Para adecuar la matriz se pesaron 100 mg de PSErf en un matraz de fondo redondo, el

cual se colocó en un baño de aceite a una temperatura constante de 150°C para su reblandecimiento, enseguida se adicionaron 10 µl de ácido acético (aditivo 1.5 % en peso) y se mantuvo en agitación con varilla de vidrio por 1 h. Finalmente se deja enfriar la mezcla anterior para aislar el material compósito. Para la preparación de los compositos con los rellenos (compuesto 1 y MOF 30 % en peso) previamente se trituró cada uno y fueron adicionados al mismo tiempo que el aditivo. El MOF se obtiene de la reacción de ácido tereftálico y el compuesto precursor a base de cobre y 2-aminopicolinamina. La mezcla resultante, se mantiene a reflujo con agitación constante. El compuesto precursor (1) se prepara con $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ al cual se le adiciona el ligando 2-picolinamina; conforme se agrega, se observa un cambio de color en el precipitado a violeta, se filtra, se lava, se seca al aire, se pesa y se calcula su rendimiento. La metodología está basada en reportes previos con algunas modificaciones (Bivián-Castro, 2023 y Bivián-Castro, 2023).

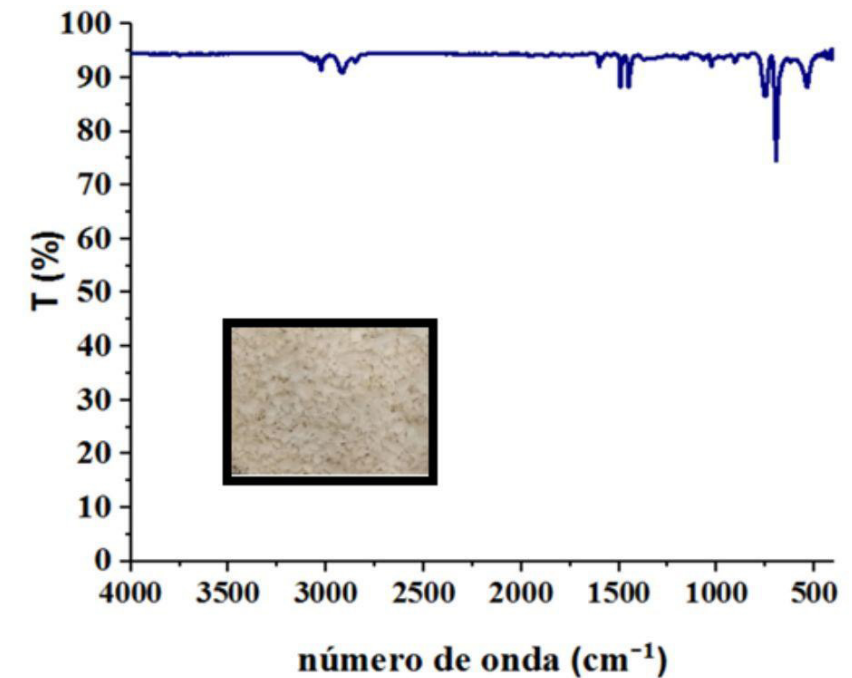
DENSIFICACIÓN

El proceso de densificación se utiliza específicamente para dar forma a los MOF y obtener su resistencia mecánica sin perder su porosidad y cristalinidad. Los MOF deben fabricarse en estructuras monolíticas sin afectar sus propiedades (Huang, 2023). En este caso se utilizó una prensa de pastillas manual Fisher scientific con un dado en la cual se comprimió el material compósito con el MOF (PS-MOF) como relleno, el procedimiento también se realizó para el PSErf, el poliestireno con ácido acético (matriz de poliestireno) y el compuesto precursor 1 y en todos los casos la forma resultante fue la de un pellet.

RESULTADOS


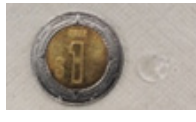
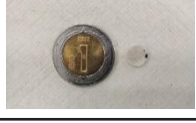
El poliestireno expandido grado residuos presentó una temperatura de fusión de 68 - 116° C, en comparación el poliestireno que tiene punto de reblandecimiento de 93.75° C (Zhang, 2022). Se muestra en la figura 4 el espectro de infrarrojo medio para el PSErf en el que se observan señales que corresponden al grupo fenilo alrededor de los 500 cm^{-1} , los grupos metileno cerca de 600 cm^{-1} , dos alrededor de los 1400 cm^{-1} que muestran dos vibraciones diferentes del grupo metilo y finalmente alrededor de los 3000 cm^{-1} se encuentran señales C-H ¹².

Figura 1. Espectro de IR de los residuos finos de poliestireno expandido



En la tabla 1, se muestran los resultados de las mediciones realizadas para los pellets de poliestireno grado residuos cuya densidad promedio fue de 0.576 g/cm^3 , pues el poliestireno en este estado resultó ser muy compresible. Se muestra un comportamiento tal que aquellos con menos masa y volumen son menos densos y viceversa. Una vez realizada la compresión mecánica de los pellets estos mostraron una gran transparencia y más fragilidad con respecto a los pellets que si fueron rellenos con algún material.

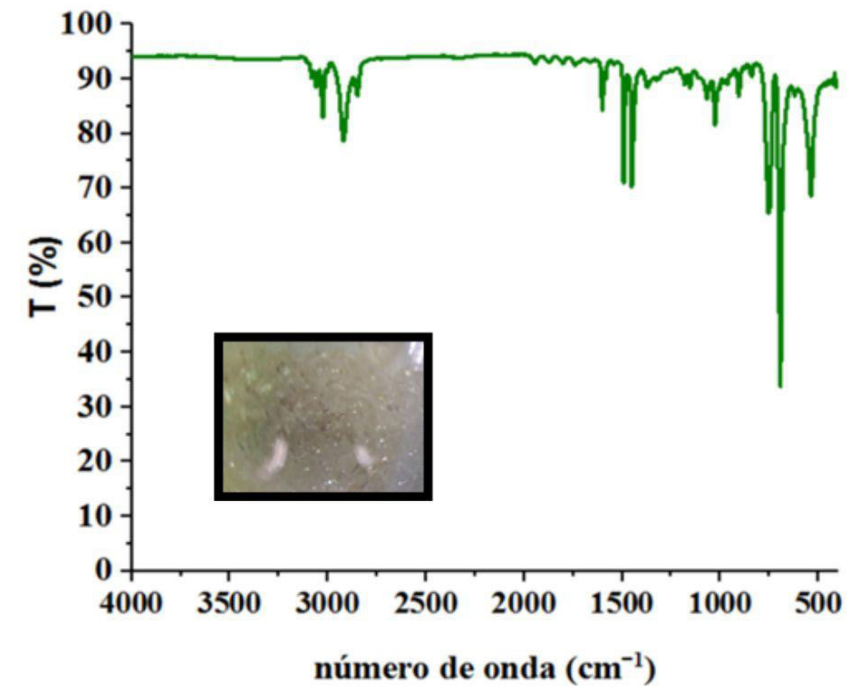
Tabla 1. Densificación del poliestireno expandido grado residuos

Pellet	Masa (g)	Volumen (cm ³)	Densidad	Imagen
Pellet 1	0.0033	0.008873	0.372	
Pellet 2	0.0110	0.019032	0.578	
Pellet 3	0.0335	0.044760	0.748	

Nota. Las monedas son una referencia para las dimensiones de los pellet



Los residuos finos de poliestireno expandido al cual se le adicionó como aditivo el ácido acético pasó de ser un poliestireno blanco y blando a un poliestireno cristalino y de gran dureza. La temperatura de fusión de la matriz adecuada fue de 80 °C - 110° C, diferente a la esperada para el poliestireno que es de 131.45° C (Zhang, 2022). Se muestra un espectro característico del poliestireno (figura 2), con un grupo fenilo alrededor de los 500 cm⁻¹, un grupo metileno cerca de 600 cm⁻¹, dos picos juntos alrededor de los 1400 cm⁻¹ que muestran dos vibraciones diferentes del grupo metilo y finalmente alrededor de los 3000 cm⁻¹ se encuentra una señal del agua (McAfee, 2000), hay una ausencia del grupo carboxilo del ácido acético posiblemente debido a la minúscula cantidad utilizada.

Figura 2. Espectro de IR de la matriz de poliestireno y foto de este material



La densidad de los pellets obtenidos para la matriz después de su densificación se muestra en la tabla 2, mostrando una densidad promedio de 0.863 g/cm³. El pellet con menos masa y volumen resultó con menos densidad y viceversa debido a la alta compresibilidad del poliestireno. El pellet con menos masa y volumen resultó con menos densidad y viceversa debido a la alta compresibilidad del poliestireno. Los pellets de la matriz de poliestireno presentaron mayor dureza, mayor rugosidad en su superficies con una variación en su densidad de 0.1 g/cm³, lo cual derivó en poca compresibilidad y después de la presión a la que fue sometido presentó poros internos que dificultaron la determinación de su densidad.

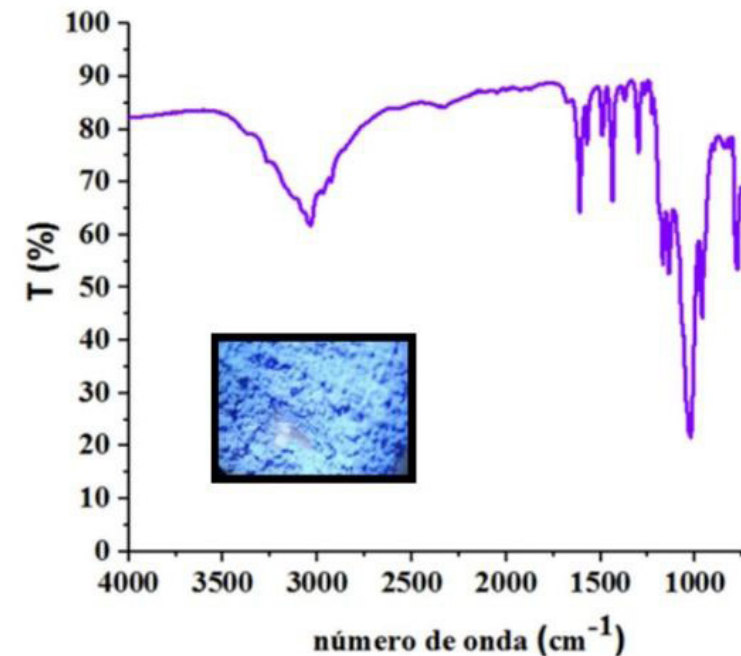
Tabla 2. Densificación de la matriz adecuada de residuos finos de poliestireno expandido

Pellet	Masa (g)	Volumen (cm ³)	Densidad	Imagen
Pellet 1	0.0320	0.03504	0.9130	
Pellet 2	0.0252	0.03097	0.8137	

Nota. Las monedas son una referencia para las dimensiones de los pellet

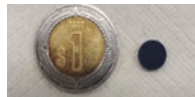

Los materiales compositos se constituyen de un material mayoritario que es la matriz y los rellenos. En la figura 3 se presenta el espectro de infrarrojo medio para el compuesto precursor 1, el cual se obtuvo en forma de polvo microcristalino color violeta. Para las pruebas de solubilidad mostró ser muy soluble en agua, parcialmente soluble en metanol, dimetilformamida, no soluble en etanol, dimetilsulfóxido, acetonitrilo y acetona. Su punto de fusión fue superior a 140° C. La interpretación de las señales de infrarrojo sugiere que alrededor de 3500 – 3000 cm⁻¹ presencia de moléculas de agua cuya banda se ve solapada con aquellas correspondientes a las vibraciones del grupo amino del ligante 2-picolinamina, además se observa una señal intensa cercana a 1000 cm⁻¹ que se puede atribuir al grupo sulfato (SO₄²⁻) 12.

Figura 3. Espectro de IR del compuesto precursor 1 y foto del relleno



Los resultados de la densificación para los materiales compositos en los que se usó como relleno el compuesto precursor 1 se muestran en la tabla 3. Los pellets mostraron una densidad promedio de 1.1265 g/cm³.

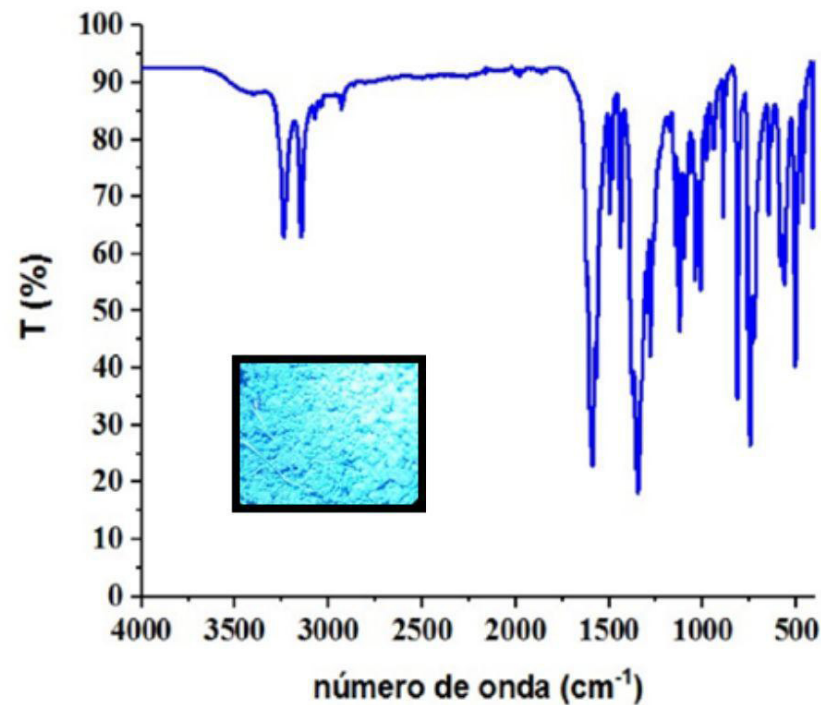
Tabla 3. Densificación del material compuesto PS-compuesto precursor 1

Pellet	Masa (g)	Volumen (cm ³)	Densidad	Imagen
Pellet 1	0.0423	0.03701	1.143	
Pellet 2	0.0378	0.03405	1.110	

Nota. Las monedas son una referencia para las dimensiones de los pellet

En este proyecto se utilizó un MOF de cobre de relleno el cual se obtuvo a partir del compuesto precursor 1. El MOF se obtuvo como un polvo de color azul, parcialmente soluble en agua, DMSO y DMF. Su punto de fusión es superior a 140 °C. En la figura 4 se muestra el espectro de infrarrojo medio con señales debido a la presencia de los ligantes, alrededor de los 3250 cm⁻¹ se pueden asignar a las vibraciones del grupo amina, en la región de 1750 – 1500 cm⁻¹ al grupo carboxilato y en 3500 cm⁻¹ se encuentra una señal proveniente del grupo hidroxilo de moléculas de agua (Bivián-Castro, 2023).

Figura 4. Espectro de IR del MOF y foto del relleno



Los resultados de la densificación del material compuesto (PS-MOF) en forma de pellets se muestran en la tabla 4. Los pellets mostraron una densidad promedio de 0.982 g/cm³, con una uniformidad como se muestra en la imagen.

Tabla 4. Densificación del compuesto PS- MOF

Pellet	Masa (g)	Volumen (cm ³)	Densidad	Imagen
pellet 1	0.0351	0.03550	0.989	
pellet 2	0.0426	0.04407	0.967	
pellet 3	0.0398	0.03998	0.995	
pellet 4	0.0324	0.03305	0.980	

Nota. Las monedas son una referencia para las dimensiones de los pellet

Una vez realizada la compresión mecánica de los pellets estos mostraron una gran transparencia y más fragilidad con respecto a los pellets que si fueron rellenos con algún material.

CONCLUSIONES

La densificación de los materiales compuestos de poliestireno con relleno del arreglo metal orgánico de MOF fue exitosa, logrando en promedio una densidad cercana a un gramo por centímetro cúbico. Esta densificación facilita el manejo del MOF, dado que al ser un polvo microcristalino, su manipulación se torna más sencilla en estado densificado.

El uso de poliestireno de grado residuos finos como matriz en el material compuesto permite aprovechar este recurso, y al ser un material relativamente inerte, no se observa ninguna alteración del MOF con el paso del tiempo. En cuanto a la tendencia en el valor de la densidad una vez densificados los materiales, se observa el siguiente comportamiento: pellet PS < pellet PS-ad < pellet PS-MOF < pellet PS-1.

Para caracterizar estos materiales, se determinaron sus puntos de fusión, el comportamiento de solubilidad y se realizó espectroscopia infrarroja. Esto permitió obtener una comprensión detallada de sus propiedades físicas y químicas.

REFERENCIAS

- Bivián, E. Y., Flores, M., Escudero, R., Gómez, V., Segoviano-Garfias, J. J., Castañeda, J., y Saavedra, Q. E. (2023). Synthesis and Characterization of a New Cu (II) Paddle-Wheel-like Complex with 4-Vinylbenzoate as an Inorganic Node for Metal–Organic Framework Material Design. *Materials*, 16(13), 4866. <https://doi.org/10.3390/ma16134866>
- Bivián, E. Y., Zepeda, A., Guzmán-Mar, J. L., Flores-Alamo, M., y Mata, B. (2023). Ion-imprinted polymer structurally preorganized using a phenanthroline-divinylbenzoate complex with the Cu (II) ion as template and some adsorption results. *Polymers*, 15(5), 1186. <https://doi.org/10.3390/polym15051186>
- Çamur, C., Babu, R., Suárez del Pino, J. A., Rampal, N., Pérez-Carvajal, J., Hügenell, P., Ernst, S.-J., Silvestre-Albero, J., Imaz, I., Madden, D. G., Maspoch, D., y Fairen-Jimenez, D. (2023). Monolithic Zirconium-Based Metal–Organic Frameworks for Energy-Efficient Water Adsorption Applications. *Advanced Materials*, 35(23), 2209104. <https://doi.org/10.1002/adma.202209104>
- Choi, S., Kim, T., Ji, H., Lee, H. J., y Oh, M. (2016). Isotropic and anisotropic growth of metal–organic framework (MOF) on MOF: logical inference on MOF structure based on growth behavior and morphological feature. *Journal of the American Chemical Society*, 138(43), 14434-14440. <https://doi.org/10.1021/jacs.6b08821>
- McAfee, L. (2000). Infrared and Raman spectra of Inorganic and coordination compounds. part A: Theory and applications in Inorganic Chemistry; part B: Application in coordination, organometallic, and Bioinorganic. *Journal of Chemical Education*, 77(9), 1122. <https://doi.org/10.1021/edo77p1122.1>
- Singh, R., Singh, G., George, N., Singh, G., Gupta, S., Singh, H., Kaur, G., y Singh, J. (2023). Copper-Based Metal–Organic Frameworks (MOFs) as an Emerging Catalytic Framework for Click Chemistry. *Catalysts*, 13, 130. <https://doi.org/10.3390/catal13010130>
- Spieß, A., Wiebe, J., Iwaschko, E., Woschko, D. y Janiak, C. (2022). Wood modification for the synthesis of MOF@ wood composite materials with increased metal–organic framework (MOF) loading. *Molecular Systems Design & Engineering*, 7(12), 1682-1696. <https://doi.org/10.1039/D2ME00163B>
- Wang, Q. y Astruc, D. (2019). State of the art and prospects in metal–organic framework (MOF)-based and MOF-derived nanocatalysis. *Chemical reviews*, 120(2), 1438-1511.
- Wu, D., Huang, X., Duan, X., Jiang, Y., Shi, D., Chang, L., Zhang, L., y He, J. (2023). Static and Time-Dependent Plasticity of Monolithic Metal–Organic Frameworks. *The Journal of Physical Chemistry C*, 127(9), 4749-4758. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c08424>
- Yang, S., Veerana, M., Yu, N., Ketya, W., Park, G., Kim, S., y Kim, Y. (2021). Copper (II)-MOF containing glutarate and 4, 4'-azopyridine and its antifungal activity. *Applied Sciences*, 12(1), 260. <https://doi.org/10.3390/app12010260>
- Yu, X., Li, B., Wu, L., Shi, D., y Han, S. (2023). Review and Perspectives of Monolithic Metal–Organic Frameworks: Toward Industrial Applications. *Energy & Fuels*, 37(14), 9938-9955. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.3c00858>
- Zhang, M., Li, M., Wang, Y., y Sun, J. (2022). Experimental study of thermal shrinkage and melt dripping properties of expanded polystyrene under various heat fluxes. *Journal of Building Engineering*, 60, 105179. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2022.105179>

Estudio teórico de moléculas de interés biológico

CHRISTIAN GUILLERMO NORIEGA COLLAZO
christian.noriega4675@alumnos.udg.mx;

FRANCISCO JOSÉ TENORIO RANGEL
jose.tenorio@academicos.udg.mx.

RESUMEN

Se realizaron cálculos de química cuántica mediante el software Gaussian 16, aplicando el método Mo6-2X/6-311++G(2p, 2d) para todas las especies químicas estudiadas. Permitiendo determinar parámetros de entalpía de disociación de enlace (BDE), potencial de ionización (IE), afinidad electrónica (EA), electronegatividad (χ), dureza química (η) y electrofilicidad (ω). Para evaluar las propiedades de los derivados de hidrazonas como posibles antioxidantes efectivos centrándose en sus propiedades moleculares, las cuales fueron comparadas con el ácido ascórbico (vitamina C) y la quercetina como modelos antioxidantes. Las moléculas seleccionadas comparten grupos OH, que pueden donar átomos de hidrógeno a especies oxidantes altamente reactivas para así inhibir o disminuir el ciclo oxidativo. Los resultados muestran que los derivados de hidrazonas con grupos fenólicos presentan una serie de características que sugieren su capacidad para actuar como antioxidantes efectivos.

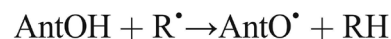
PALABRAS CLAVE

Radicales Libres (Free Radicals), Antioxidante (Antioxidant), Hidroxilos (Hydroxyls), Entalpía de disociación de enlace (BDE) (Bond Dissociation Enthalpy) y Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT) (Density Functional Theory).

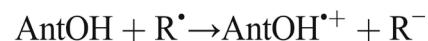
INTRODUCCIÓN

Los radicales libres son átomos o moléculas altamente reactivas que contienen al menos un electrón desapareado en su capa externa, lo que los hace inherentemente inestables y propensos a buscar estabilidad mediante

la interacción con otras moléculas, provocando procesos de oxidación. Entre los tipos más comunes de radicales libres se encuentran los radicales hidroxilo ($\cdot\text{OH}$), los radicales peroxilo ($\cdot\text{OOH}$), los radicales superóxido ($\cdot\text{O}_2^-$) y los radicales nitrito ($\cdot\text{NO}$), Cada uno de estos tipos posee características específicas que determinan su capacidad para interactuar con su entorno químico y biológico, lo que puede influir en su actividad oxidativa y en sus efectos sobre las células y los tejidos del organismo. Por otra parte, los antioxidantes son compuestos químicos que interactúan con los radicales libres y los neutralizan, donando electrones o aceptando especies oxidativas, lo que interrumpe la cadena de reacciones oxidativas impidiéndoles causar daño. El cuerpo produce algunos de los antioxidantes que usa para neutralizar los radicales libres. No obstante, depende de fuentes externas para obtener el resto de los antioxidantes que necesita. (Instituto Nacional Del Cáncer, sf.; Coronado et al, 2015). Las hidrazonas son una clase importante de compuestos, poseen una serie de propiedades antimicrobianas, antidepresivas, analgésicas-antiinflamatorias, antivirales, anti cancerígenas entre otras. Sus aplicaciones son muy variadas, incluyendo usos industriales y biológicos, pero principalmente medicinales. Por lo tanto se estudian las propiedades antioxidantes de algunos derivados de hidrazonas con grupos fenólicos para los cuales se ha reportado actividad antioxidante. (Tayade et al., 2022) Esta se puede determinar mediante una variedad de ensayos con diferentes mecanismos, que incluyen la transferencia de átomos de hidrógeno (HAT), y la transferencia de un solo electrón (ET). En el primer mecanismo, la reactividad del antioxidante (AntOH), que consiste en romper el enlace -H, se estima calculando la energía de disociación de enlace (BDE) de O-H. (García et al., 2019; Hernández et al., 2020)



En otro mecanismo, se supone que hay una donación completa de un electrón al radical libre. La viabilidad de este mecanismo se relaciona con parámetros conceptuales de DFT, como IE, dureza, electronegatividad, y electrofilicidad (García et al., 2019; Hernández et al 2020).



Las moléculas estudiadas, llamados 4-[(1E)-1-hydrazinylideneethyl] benzene-1,3-diol (Componente 1) y 4,4'((1E,1'E)-hydrazine-1,2-diylidenebis (ethan-1-yl-1-ylidene))bis(benzene-1,3-diol) (Componente 2), (Figura 1) y sus propiedades electrónicas fueron comparadas con el Ácido ascórbico y la Quercetina (Figura 2) ya que fueron consideradas moléculas modelos con actividad como antioxidante. (Vázquez et al, 2022)

Figura 1. Derivados de hidrazonas estudiadas con posible actividad antioxidante

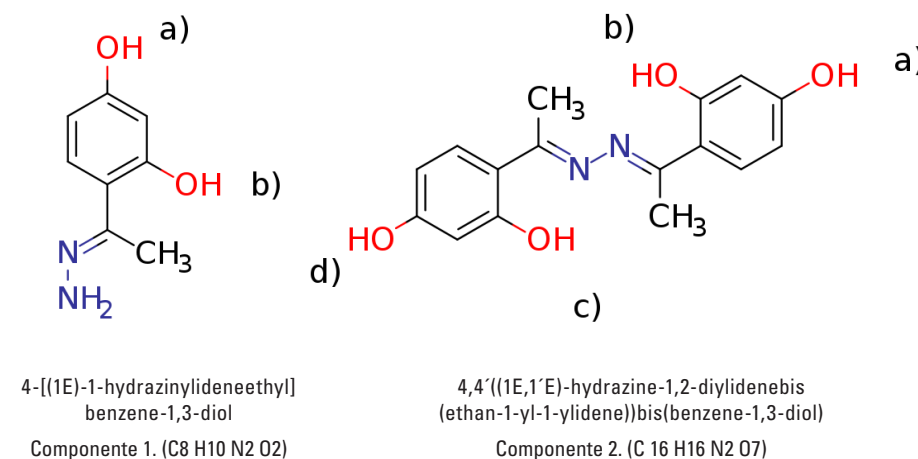
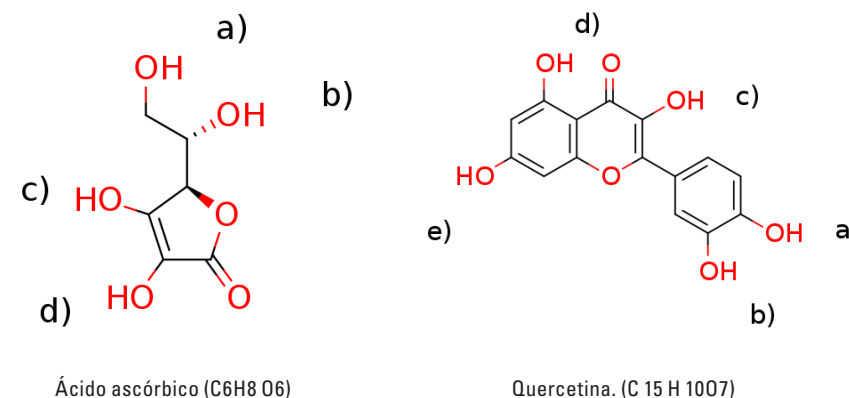


Figura 2. Estructuras utilizadas como modelo de actividad antioxidante



El impacto que tienen en la salud los radicales libres y su neutralización, quedó patente en 1992 cuando se llevó a cabo un estudio en el que se evaluó la incidencia de enfermedades coronarias en la población francesa, una población con una dieta rica en grasas saturadas.⁵ En la actualidad, se han acumulado evidencias que permiten afirmar que los radicales libres y el conjunto de especies reactivas de oxígeno (ROS) que se les asocian, juegan un papel central en nuestro equilibrio homeostático (Rivarola, E. y Salomón, S.E 2010; Galina, 2018). Aunque la vida media del radical libre es de microsegundos, en los organismos vivos y en concentraciones altas, tienen la capacidad de reaccionar con todo lo que esté a su alrededor provocando gran daño a moléculas, membranas celulares y tejidos. Asimismo, en la industria de alimentos la oxidación de lípidos es una de las principales causas del deterioro de la calidad y es un desafío tanto para los fabricantes como para los científicos (Avello, M. y Suwalsky, M., 2006; Fereidoon y Ying, 2015). De esta forma, el estudio de las propiedades antioxidantes de estas moléculas contribuye al conocimiento actual y permite predecir su capacidad para neutralizar radicales libres, desempeñando un papel importante en el área de la salud y la industria.

MATERIALES Y MÉTODOS

Las geometrías iniciales se extrajeron de la base de datos de estructuras de Cambridge con CCDC No 1009469 y 1402230, y Pubchem. Se utilizó el software Gaussian 16 para realizar todos los cálculos y GaussView para la construcción y análisis de las estructuras. (Frisch et al, Gaussian16 y Dennington et al, GaussView v.6). Todas las geometrías moleculares se optimizaron con el funcional Mo6-2X, y el conjunto de base 6-311++G (2p, 2d). El conjunto 6-311++G (2d, 2p) y el método Mo62X son herramientas para llevar a cabo cálculos de química cuántica. Estos elementos son esenciales para describir con precisión la distribución electrónica en una molécula, utilizando funciones gaussianas para aproximar la densidad electrónica en los átomos. Los números “6” y “311” indican la cantidad de funciones utilizadas para describir los electrones de las capas internas y de valencia, respectivamente. Los signos “++” señalan que se incluyen conjuntos de funciones difusas para abordar los electrones de valencia y la polarización de los enlaces. La especificación “(2d, 2p)” significa que se agregan orbitales “d” y “p” adicionales para tratar la polarización de

todos los elementos estudiados, incluido el hidrógeno. Mo6-2X es un método derivado de la teoría de los funcionales de la densidad (DFT), y suele usarse porque proporciona resultados más precisos en comparación con otros métodos. Con este funcional se calcularon propiedades moleculares y de energía con mayor precisión. La BDE ayuda a medir la viabilidad de la donación de electrones al radical libre. Por otra parte, la estabilidad y baja reactividad del nuevo radical formado por el mecanismo antioxidante, se relaciona con parámetros conceptuales de la Teoría de Funcionales de la Densidad como Energía de ionización (IE), dureza, electronegatividad y electrofilicidad, midiendo así la eficiencia en términos de donación-aceptación de electrones. Se realizaron cálculos de frecuencia para caracterizar cada una de las especies neutras y radicales como mínimos sobre la superficie de energía potencial y para evaluar las correcciones de energía de punto cero incluidas en los valores de BDE. (Hernández, D.A.. 2020; Palepu et al., 2015)

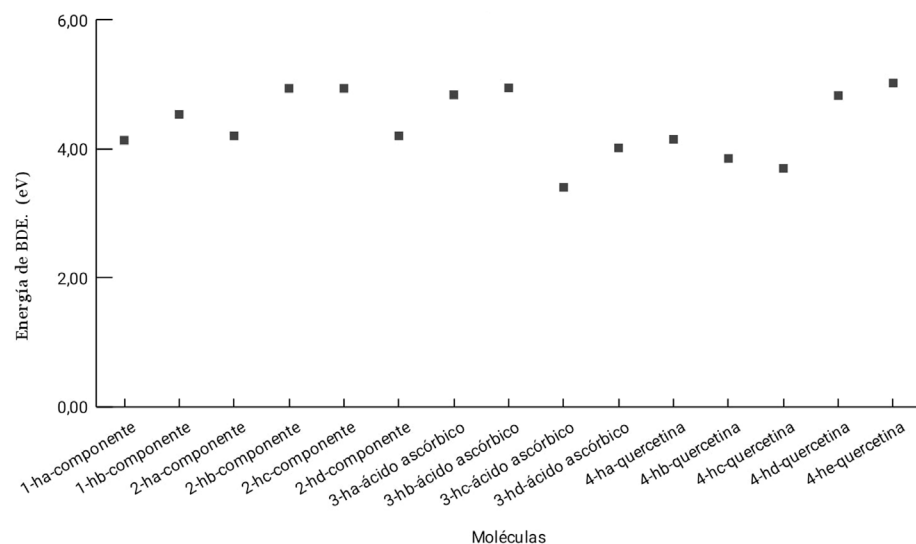
La IE calculada y la afinidad electrónica (EA) fueron calculadas en vertical. De este modo, $IE = E_{cation} - E_{neutral}$, y $EA = E_{neutral} - E_{anion}$. El cálculo de BDE para las disociaciones de enlaces OH fue el siguiente: $BDE = H_r + HH + H_{neutral}$. Aquí, H_r es la entalpía de los radicales generados, HH , es la entalpía de un átomo de hidrógeno, y $H_{neutral}$, es la entalpía de la molécula neutra. El cálculo de la electrofilicidad requiere electronegatividad y dureza. La electronegatividad fue calculada según $\chi = (IE + EA) / 2$. El cálculo de la dureza química se realizó según la fórmula $\eta = (IE - EA) / 2$. El cálculo del índice de electrofilicidad es $\omega = (\chi^2 / 2\eta)$. IE y EA también se utilizaron para calcular el poder electrodonador (ω^-) y electroceptor (ω^+). Por lo que $\omega^- = (3IE + EA) / 16 (IE - EA)$ y $\omega^+ = (IE + 3EA) / 16 (IE - EA)$ (Hernández et al 2020; Rivas et al 2013).

RESULTADOS

La energía de disociación de enlace se relaciona con la capacidad de donación de electrones e hidrógeno en términos de la facilidad con la que se puede romper el enlace X-H. Un valor bajo este parámetro indica un aumento en la posibilidad de donación de hidrógeno, que resultaría en la estabilización de los radicales libres de un ciclo oxidante. El cálculo de BDE para el ácido ascórbico y la quercetina tienen valores mínimos de 3.4 eV y 3.7 eV, respectivamente. Aunque el resto de moléculas calculadas tienen

valores más altos, en general se encuentran por debajo de 5 eV, por lo que pueden considerarse como posibles antioxidantes (Imagen 3).

Figura 3. Gráfico de las energías de BDE obtenidas en electrón voltio (eV)



La nomenclatura de las moléculas corresponde a los diferentes átomos de hidrógeno considerados en las reacciones HAT mencionados en la Figura 1 y 2. Así, 1-ha-componente, se refiere al hidrógeno "a" del primer compuesto estudiado. 1-hb-componente, al hidrógeno b y así sucesivamente.

La energía de ionización es una herramienta popular para medir la capacidad antioxidante. Este índice puede indicar la posibilidad de una donación de electrones del antioxidante a especies altamente oxidantes. Un IE más bajo significa una mayor capacidad para la donación de electrones. Los resultados obtenidos de IE de las moléculas estudiadas son menores a los modelos antioxidantes propuestos que tienen una energía de 9.26 eV para el ácido ascórbico y 7.98 eV para la quercetina. De acuerdo a esto, se puede considerar a las moléculas estudiadas como buenos donadores de electrones con IE de 7.79 eV para el Componente 1 y 7.56 eV para el Componente 2.

Por otra parte la EA puede estimar el comportamiento de aceptación de electrones; los valores bajos representan moléculas noceptoras de electrones adecuadas. Los resultados de EA para el Componente 2 con

0.73 eV y la quercetina con 0.5 eV son los valores más altos obtenidos. En cuanto al Componente 1 con una EA de -0.57 eV y el ácido ascórbico con -0.49 eV, no se consideran moléculasceptoras de electrones adecuadas debido a los valores de EA negativos.

La dureza mide la resistencia por parte del potencial químico para cambiar el número de electrones. Esto significa que, a mayor dureza, menor es la posibilidad de cambio en la distribución electrónica, lo que manifestaría una menor actividad antioxidante. Acorde a esto, el Componente 2 tiene el valor más bajo de dureza con 3.42 eV, seguido de la quercetina con 3.74 eV, reafirmando su actividad antioxidante. El par de moléculas restantes presentan valores similares aunque un poco más altos. La electronegatividad y la electrofilicidad con valores relativamente altos pueden ser indicativas de buenos antioxidantes. χ y η presentan resultados próximos a los valores de los modelos antioxidantes. Resultados bajos para el poder electrodonador ω - indican una mayor capacidad de donación de carga, mientras que valores altos de $\omega+$ una mayor capacidad para aceptar una carga. El Componente 1 presenta la mayor capacidad para donar carga, incluso comparado con los antioxidantes de referencia. Por otro lado, el Componente 2 sería el que tiene más capacidad de aceptar carga (Tabla 1).

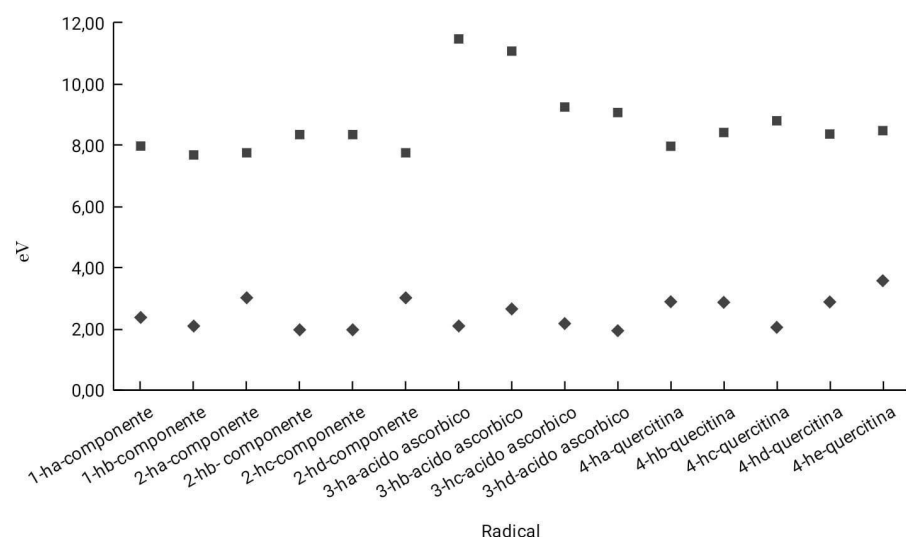
Tabla 1. Energías de ionización, afinidades electrónicas, electronegatividad, dureza, electrofilicidad, poder electrodonador y electroceptor estudiados en M06-2X 6-311++G (2p, 2d)

MOLÉCULA	IE	EA	χ	η	ω	$\omega-$	$\omega+$
Componente 1	7.79	-0.57	3.61	4.18	1.56	3.88	0.28
Componente 2	7.56	0.73	4.14	3.42	2.51	5.01	0.87
Ácido ascórbico	9.26	-0.49	4.38	4.88	1.97	4.77	0.39
Quercetina	7.98	0.50	4.24	3.74	2.40	4.99	0.75

La estabilidad y baja reactividad del radical formado asociada con buenos compartimientos antioxidantes también se puede estimar mediante parámetros de DFT conceptuales. Los radicales formados muestran la diferencia de un aumento de IE no mayor a 2 eV en comparación con las especies no radicales. Como ya se ha mencionado, esta energía indica la posibilidad de obtener un electrón adicional de la especie radical a una especie oxidante.

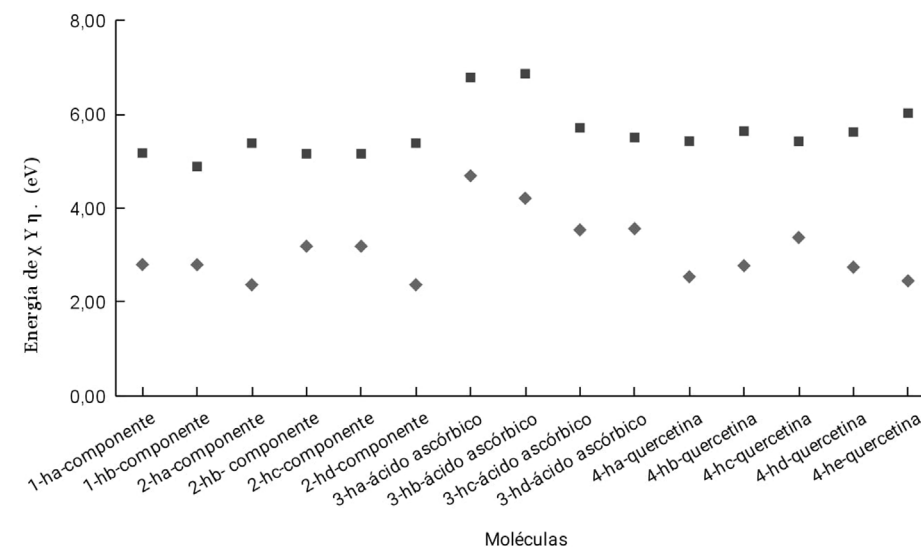
El valor más alto de IE es para el radical h-a del ácido ascórbico con 11.48 eV y el mínimo corresponde al radical h-b del Componente 1 con 7.69 eV. Para el conjunto de moléculas radicales estudiadas un IE bajo es indicativo de una mayor posibilidad en la donación de electrones, es decir una menor actividad oxidante lo que sugiere un radical con baja reactividad. EA para las especies radicales, muestra un aumento de aproximadamente 2 eV por lo que su predisposición a aceptar electrones y reducir los efectos oxidantes de los radicales libres aumenta (Figura 4).

Figura 4. Gráfico de las energías de ionización (cuadrados) y afinidad electrónica (rombos) para los radicales estudiados en eV



En cuanto a la dureza electrónica, se observa una disminución de energía en todas las especies estudiadas, lo que las hace susceptibles a un cambio en su distribución electrónica. Se observa que el Componente 2 tiene los valores más bajos, mientras que el ácido ascórbico tiene los más altos (2.37 eV y 3.57 eV, respectivamente). Asimismo, la electronegatividad muestra una tendencia similar a IE, con aumentos en su energía no mayores a 2 eV, manteniendo valores menores y una baja reactividad en comparación con los modelos antioxidantes propuestos con 6.3 eV para la quercetina (Figura 5).

Figura 5. Gráfico de la electronegatividad (cuadrados) y la dureza (rombos) de los radicales estudiados en eV



La nomenclatura de las moléculas corresponde a los diferentes átomos de hidrógeno considerados en las reacciones HAT mencionados en la Figura 1 y 2. Así, 1-ha-componente, se refiere al hidrógeno "a" del primer compuesto estudiado. 1-hb-componente, al hidrógeno b y así sucesivamente.

CONCLUSIONES

Los resultados apuntan a que los compuestos estudiados presentan índices de reactividad que sugieren su capacidad para actuar como antioxidantes efectivos. Pese a pertenecer a la misma familia de compuestos, presentan un comportamiento diferente para la neutralización de los radicales libres; por una parte, el componente 1 muestra una mayor predisposición para donar electrones que podrían interrumpir la cadena de oxidación, mientras que el componente 2 tendría una mejor capacidad para aceptar electrones y reducir los efectos oxidantes de los radicales libres.

Sin embargo, es importante reconocer las limitaciones de esta investigación y las áreas de incertidumbre en los resultados, por lo que es importante continuar investigando estas moléculas y profundizar en la comprensión de los mecanismos antioxidantes para explorar su potencial aplicación en diversos contextos clínicos y terapéuticos, e industriales.

REFERENCIAS

- Avello, M., y Suwalsky, M. (2006). Radicales libres, antioxidantes naturales y mecanismos de protección. *Atenea*, (494). <https://doi.org/10.4067/s0718-04622006000200010>
- Coronado, H., Vega, M., Salvador, L., Gutiérrez, T., Vázquez, R. y Radilla, V. (2015). Antioxidantes: perspectiva actual para la salud humana. *Revista chilena de nutrición*, 42(2), 206-212. <https://dx.doi.org/10.4067/S0717-75182015000200014>
- Coronado, M.; Vega, S.; Gutiérrez, L.R.; Vázquez, M. y Radilla, C. (2015). Antioxidantes: perspectiva actual para la salud humana. *Revista chilena de nutrición*, 42(2), 206-212. <https://doi.org/10.4067/S0717-75182015000200014>
- Fereidoon, S y Ying, Z. (2015). Measurement of antioxidant activity. *Journal of Functional Foods*, (18), 757-781. <https://doi.org/10.1016/j.jff.2015.01.04>
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., ..., Fox, D. J. (2016). *Gaussian 16, Revision C.01* [Software]. Wallingford, CT: Gaussian, Inc.
- Galina, M. A. (2018). Estrés oxidativo y antioxidantes. *Avances en Investigación Agropecuaria*, 22(1), 29-46.
- García, W; Lezama, H y Pumachagua, R. (2019). Estudio teórico de la actividad antioxidante de compuestos aromáticos con bases de Schiff heterocíclicas sustituidos en posiciones META y PARA. *Revista de la Sociedad Química del Perú*, 85(2), 242-257.
- Halliwell B. (2009). How to characterize a biological antioxidant. *Free Radical Research Communications*, 9(1), 1-32 <https://doi.org/10.3109/10715769009148569>
- Hernández, D.A; Rodriguez, J.G. y Tenorio, F.J. (2020). DFT study of antioxidant molecules from traditional Japanese and Chinese teas: comparing allylic and phenolic antiradical activity. *Struct Chem*, (31) 359-369. <https://doi.org/10.1007/s11224-019-01411-z>
- Instituto Nacional Del Cáncer. (s. f.). *Antioxidantes y prevención del cáncer*. <https://www.cancer.gov/espanol/cancer/causas-prevencion/riesgo/dieta/hoja-informativa-antioxidantes>
- Kim, S; Chen, J; Cheng, T; Gindulyte, A; He, J; He, S; Li, Q; Shoemaker, B. A; Thiessen, P. A; Yu, B; Zaslavsky, L; Zhang, J. y Bolton, E. E. (2023). PubChem 2023 actualización. *Nucleic Acids Res*, 51(D1). <https://doi.org/10.1093/nar/gkac956>
- Palepu, NR; Nongbri, SL; Premkumar, JR; Verma, AK; Bhattacharjee, K; Joshi, SR; Forbes, S; Mozharivskyj, Y; Thounaojam, R; Aguan, K. y Kollipara, M.R. (2015). Synthesis and evaluation of new salicylaldehyde-2-picolinylhydrazone. Schiff base compounds of Ru(II), Rh(III) and Ir(III) as in vitro antitumor, antibacterial and fluorescence imaging agents. *J Biol Inorg Chem*, 20(4), 619-638. <https://doi.org/10.1007/s00775-015-1249-3>
- Rivarola, E. y Salomón, S.E. (2010). Antioxidantes: historia y evolución. *Revista Médica Universitaria*, 6(4). <https://bdigital.uncu.edu.ar/3901>
- Rivas, C; Núñez, J. y Marquez, E. (2013). Predicción teórica de la constante de sustituyente de Hammett usando el índice de electrofilicidad. *Saber*, 25(4), 445-448.
- Tayade, K.; Yeom, G.S.; Sahoo, S.K.; Puschmann, H.; Nimse, S. B y Kuwar, A. (2022). Exploration of Molecular Structure, DFT Calculations, and Antioxidant Activity of a Hydrazone Derivative. *Antioxidants* 11(11) <https://doi.org/10.3390/antiox11112138>
- Van Mourik, T; Bühl, M y Gageot, MP. (2014). Density functional theory across chemistry, physics and biology. *The Royal Society* 372(2011). <https://doi.org/10.1098/rsta.2012.0488>
- Vázquez, A; Mejía, J; D., Garcia, K. y Velázquez, G. (2022). Capacidad antioxidante: conceptos, métodos de cuantificación y su aplicación en la caracterización de frutos tropicales y productos derivados. *Revista Colombiana De Investigaciones Agroindustriales*, 9(1), 9-33. <https://doi.org/10.23850/24220582.4023>

Evaluación del efecto antibacterial frente escherichia coli de nanopartículas de plata sintetizada de forma ecológica

VALERIA GUADALUPE HERNÁNDEZ FLORES
valeria.hflores@alumnos.udg.mx;

CÉSAR EULOGIO ORTEGA CARDONA
eulogio.ortega@alumnos.udg.mx;

RESUMEN

Se llevó a cabo la síntesis de nanopartículas de plata en forma ecológica o verde, utilizando como agente reductor extracto acuoso de cáscara de tuna roja “cardona” (*O. streptacantha* cv. *Jocoquillo*). La formación de nanopartículas fue comprobada mediante el cambio de coloración en la solución y el análisis por espectroscopia UV-Vis con un pico a una longitud de onda de 435 nm, mostrando las características espectrales de las AgNP. Se evaluó su actividad antibacterial frente al patógeno *Escherichia coli*, expuesto a la solución coloidal que contiene las nanopartículas de plata sintetizadas, con tiempos de interacción de 0 y 30 minutos. Obteniendo como resultado las propiedades antibacteriales de las nanopartículas de plata sintetizadas de forma ecológica o verde frente a células bacterianas multirresistentes, y que a su vez muestran un potencial estabilizante y compatible con el medio ambiente.

PALABRAS CLAVE

Nanopartículas de plata (Silver nanoparticles), Síntesis verde (Green synthesis), Efecto antibacterial (antibacterial effect), Extracto acuoso (aqueous extract) *Opuntia streptacantha* (*Opuntia streptacantha*)

INTRODUCCIÓN

Recientemente, se ha convertido en una necesidad desarrollar nuevos materiales con características bacteriostáticas y/o bactericidas, debido a la resistencia que actualmente presentan varias cepas bacterianas frente

a diversos fármacos o agentes antibacteriales. La prevalencia de estos patógenos multirresistentes, que en muchos de los casos son provocados por la contaminación cruzada de los alimentos durante el almacenamiento y transporte de estos, son causantes de múltiples enfermedades transmitidas a nivel mundial y de pérdidas económicas. Por lo tanto, es de gran importancia desarrollar materiales o agentes antibacterianos eficientes, y que además tengan características de ser amigables ecológicamente y no tóxicos para que sean empleados como una alternativa potencial para la inhibición de estos patógenos transmitidos por alimentos.

Se ha discutido ampliamente que las nanopartículas de plata (AgNP) poseen el mejor efecto antimicrobiano con la ecotoxicidad más baja en el medio ambiente (Kakakhel *et al.*, 2021), siendo presentada como una alternativa novedosa y potencial a los antibióticos estándar; que actualmente se encuentra en uso dentro del campo de la nanotecnología, la cual ofrece la síntesis de nanomateriales biocompatibles a base de metales que se pueden aplicar a una amplia gama de aplicaciones potenciales en las ciencias médicas y biológicas, incluido la medicina, la administración de fármacos (Mathur *et al.*, 2018) el recubrimiento y la conservación de alimentos (Sierra Fernández *et al.*, 2017), la industria alimentaria y la remediación ambiental (Singh *et al.*, 2018), los cuales cuentan con la aprobación de una variedad de organismos acreditados, incluidos La Administración de Alimentos y Medicamentos (FDA, siglas en inglés) de EE.UU.

Por lo que, en la presente investigación, se evaluará el efecto antibacterial de nanopartículas de plata (AgNP) sintetizadas de forma ecológica o verde, utilizando como agente reductor extracto acuoso de cáscara de tuna roja “cardona” (*O. streptacantha* cv. Jocoquillo), ante patógenos de carácter multirresistente. La síntesis verde de nanopartículas ayuda a minimizar el uso de disolventes y reactivos peligrosos, tóxicos y no biodegradables, el extracto acuoso de cáscara de tuna funciona como sustrato para la síntesis de nanopartículas por sus características de agente reductor. Estos métodos biológicos tienen una serie de beneficios, ya que proporcionan un alto rendimiento que implica un uso y generación mínimo de sustancias tóxicas, por lo tanto, son considerados como métodos eficaces, seguros y respetuosos con el medio ambiente en la síntesis de nanopartículas (Ahmed *et al.*, 2016).

NANOPARTÍCULAS DE PLATA (AGNP)

La plata a nanoescala es una partícula nanométrica con una alta relación área superficial/volumen (Morones-Ramírez *et al.*, 2013); debido a sus propiedades biológicas, químicas y físicas las nanopartículas de plata (AgNP) se han utilizado durante siglos debido a su actividad antimicrobiana con evidencia subjetiva del uso de plata coloidal en la antigua Roma y Egipto (Reidy *et al.*, 2013), actualmente su aplicación se encuentra enfocada en su uso como agente bactericida o fungicida, por su alta resistencia contra una variedad de microorganismos infecciosos y patógenos.

Las propiedades físicas y químicas de las nanopartículas generadas a través de diversos métodos biológicos hacen que tengan diversas funciones y aplicaciones. Entre estas aplicaciones, la actividad antibacterial ha ganado mucha atención porque potencialmente ofrece una solución al problema de la resistencia a los antibióticos (Cho *et al.*, 2005) y a la contaminación generada durante la manipulación de algunos alimentos antes de llegar a su consumidor final.

SÍNTESIS VERDE DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA

La síntesis biológica de una nanopartícula se denomina síntesis verde (Ovais *et al.*, 2016); está comprobado que las plantas representan una fuente buena de metabolitos secundarios de plantas bioactivas, como polisacáridos, proteínas, polifenoles, flavonoides, terpenoides, alcaloides, que actúan como agentes reductores, estabilizadores y protectores en la conversión de iones metálicos en nanopartículas metálicas, lo que lleva a la producción de nanopartículas con características predefinidas.

Anteriormente, las propiedades antibacteriales de la plata y el nitrato de plata estaban bien incorporadas en el campo de la ciencia médica; también se conocía la importancia medicinal de innumerables plantas y partes de plantas, como frutas, hojas, semillas, flores, cortezas, raíces y tallos. El proceso de síntesis de AgNP mediante síntesis verde a partir de plantas implica la interacción del nitrato de plata (AgNO_3) con las biomoléculas que se encuentran en los extractos de plantas, demostrado que los metabolitos en cada especie de planta tienen diferentes componentes químicos con acciones protectoras y reductoras que son importantes para la reducción de iones de plata. En general, el mecanismo de síntesis de nanopartículas metálicas en plantas y/o extractos de plantas comienza por la unión de iones metálicos

(fase de activación) con los metabolitos reductores o agentes estabilizantes para así reducirse a átomos metálicos; el complejo resultante del ion metálico y el metabolito interactúa con complejos similares formando una pequeña nanopartícula metálica; a continuación, se produce el crecimiento (fase de crecimiento) y la coalescencia de partículas pequeñas separadas en otras de mayor tamaño mediante el proceso de engrosamiento. Este proceso continúa hasta que las partículas asumen una forma y tamaño estables (fase de terminación); proceso el cual está fuertemente influenciado por la capacidad del extracto vegetal. (Makarov VV *et al.*, 2014)

APLICACIÓN ANTIBACTERIAL DE LAS NANOPARTÍCULAS DE PLATA

La resistencia microbiana es un problema de salud mundial de alto interés, debido a su impacto y aumento junto con sus limitaciones, como alto costo, toxicidad, baja solubilidad y efectos secundarios graves (Kakakhel *et al.*, 2021). Esta particularidad otorga a los materiales a base de plata, como las AgNP, un papel relevante en la actual crisis antibiótica para la lucha contra las bacterias multirresistentes. Las nanopartículas de plata han exhibido una actividad altamente antibacteriana contra múltiples bacterias Gram-positivas y Gram-negativas (Cavassin *et al.*, 2015). Estudios aplicados en la evaluación de actividad microbiana en nanopartículas de plata sobre cepas de *E. coli* y *Staphylococcus aureus*, han establecido que a una baja concentración de AgNO₃, se obtienen efectos inhibidores de crecimiento en ambas cepas; sugiriendo así la aplicación de nanopartículas de plata como sistemas de control antimicrobiano.

El mecanismo de la acción inhibidora de los iones de plata sobre los microorganismos se basa en la creencia en que el ADN pierde su capacidad de replicación y las proteínas celulares se desactivan con el tratamiento Ag⁺. Además, se demostró que las AgNP se une a los grupos funcionales de las proteínas, lo que resulta en una desnaturalización de las proteínas. El punto crítico para garantizar este efecto se da en la unión a la pared celular y membrana del microorganismo, y el daño posterior de las biomoléculas y estructuras intracelulares junto con el estrés oxidativo inducido, causado tanto por las AgNP como por los iones de plata liberados (Franci *et al.*, 2015)

EL GÉNERO OPUNTIA

La planta de cactus *Opuntia spp.*, comúnmente llamada tuna, es una planta angiosperma y dicotiledónea, que pertenece a la familia cactácea, es una planta endémica de regiones áridas y semiáridas, ampliamente distribuida en México. Su composición química está basada en: agua (92 %), carbohidratos (4-6 %), proteínas (1 %), grasas vegetales (0.2 %), minerales (1 %) y vitaminas, principalmente ácido ascórbico; presentando un alto contenido de polifenoles responsables de su efecto antioxidante (Silva de Hoyos *et al.*, 2012). La cáscara, aunque no se consume como alimento, presenta componentes basados en: 3.8 % (en base húmeda) de lípidos, entre ellos se encuentran los lípidos totales (LT), los lípidos neutros en gran cantidad (63.3 % de los LT), seguidos por los glucolípidos (GL) (26 % de LT) y fosfolípidos (8.75 % de LT), carotenos y tocoferoles (vitamina E) en alta concentración, los α -tocóferoles constituyen aproximadamente un 80.5 %, β -tocóferoles 10.2 %, γ -tocóferoles 8 % y δ -tocóferoles 1.20 %. También se han reportado vitamina K₁ (1.09g/Kg) (Ramadan & Mörsel, 2003).

Debido a sus propiedades biológicas atractivas y farmacológicas, estudios reportan que bajo ciertas circunstancias sus principales componentes como el ácido ascórbico, el ácido gálico, la glucosa, la fructosa, la sacarosa, la celulosa, la pectina, entre otros; actúan como excelentes agentes reductores de iones metálicos. Sin embargo, la proporción de estos componentes favorece tanto a la reducción como estabilización de nanopartículas, evitando su aglomeración (Lee y Jun, 2019).

MATERIALES Y MÉTODOS

Los reactivos utilizados fueron Nitrato de plata (AgNO₃) (Sigma Aldrich) al 5mM. Para la evaluación microbiológica se utilizó agua peptonada (Merck) al 0.1 %, caldo LB Broth (Miller) (Condalab) y agar de eosina azul de metileno (EBM) (MCD LAB). La cepa que se utilizó fue *Escherichia-coli* (ATCC 11229).

REACTIVACIÓN DE LA CEPA ESCHERICHIA-COLI

Las cepas se encontraban en conservación por el método de congelación (-80° C) empleando como agente crioprotector glicerol. Para el proceso de reactivación, se realizó el inóculo de *Escherichia-coli* en tubos que contenían caldo LB Broth (Miller) y se incubaron durante un periodo de 24 horas a

37° C. Transcurrido el tiempo de incubación, se realizó el conteo celular, registrando una concentración celular entre $1-3 \times 10^6$ UFC/ml.

PREPARACIÓN DE EXTRACTO ACUOSO DE CÁSCARA DE TUNA

Los extractos acuosos se elaboraron a una concentración del 4 % de polvo de cáscara de tuna “cardona”. La mezcla se llevó a agitación constante de 700 rpm por un tiempo definido de 2 horas, a temperatura ambiente. Posterior a la agitación se realizó la centrifugación del extracto durante 20 minutos a 5000 rpm; y posteriormente el sobrenadante se filtró al vacío, y el filtrado resultante se utilizó como agente reductor para la síntesis de AgNP.

SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA (AGNP)

El proceso de síntesis de las nanopartículas de plata se realizó mezclando 20 % (v/v) de extracto acuoso, 50 % (v/v) de $AgNO_3$ al 5 mM y el 30% restante de agua destilada. Posteriormente se realizó un ajuste de pH a 7. La solución formada (Tabla 1) se dejó reaccionar por 24 horas a temperatura ambiente y protegida de la luz.

Tabla 1. Preparación de solución coloidal

pH	Extracto	AgNO3 (5 mM)	Agua destilada
7	2 ml.	5 ml.	3 ml.

CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA

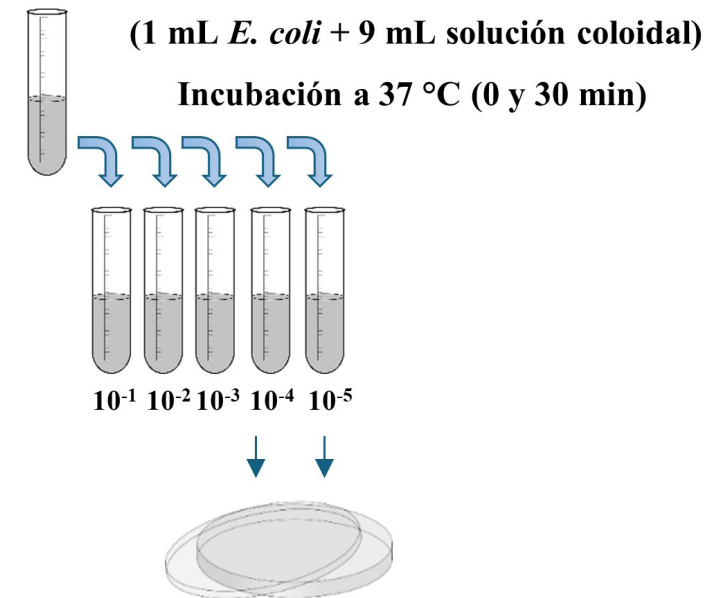
La formación de las AgNP se observó mediante un cambio de color en las soluciones, además las soluciones coloidales se escanearon en un rango de longitud de onda de 300 a 800 nm en el espectrofotómetro UV-Vis Cary 60 (Agilent) para la observación de la formación del plasmón de resonancia.

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIAL DE LAS NANOPARTÍCULAS DE PLATA

La actividad antibacteriana se realizó contra la cepa patógena *E. Coli*; la cual se cultivó 24 horas antes de la evaluación activada en caldo LB Broth (Miller) para obtener una concentración celular de $1-3 \times 10^6$ UFC/ml. Para la evaluación de la actividad antibacteriana se realizó el siguiente ensayo, utilizando la solución coloidal a un pH de 7.

A partir de la activación de la cepa de *E. coli*, se procedió a realizar las pruebas antibacteriales. Se añadió cultivo de *E. coli* (1 ml, $1-3 \times 10^6$ UFC/ml) a 9 ml de la solución coloidal para probar el efecto antibacteriano con tiempos de reacción aplicados de 0 y 30 minutos. Se realizaron diluciones en serie con agua peptonada al 0.1 %, se sembró 1 ml de muestras en placas Petri por medio de la técnica vertido en placa con Agar de eosina azul de metileno (EMB), se realizó la homogenización y se dejaron solidificar y se incubaron por 24 horas a 37 ± 1 °C (Figura 1). Los resultados se expresaron como UFC/ml.

Figura 1. Determinación de actividad antibacteriana de las nanopartículas de plata frente a *E. coli*.



RECuento VIABLE DE UFC/ML

Al finalizar el tiempo de incubación se retiraron las placas de incubación, y se realizó el recuento de UFC/ml por medio de un contador de colonias, para determinar con ello la concentración de la suspensión celular resultante en cada dilución.

RESULTADOS

La síntesis de nanopartículas de plata se comprobó mediante el cambio de coloración de color marrón claro a café oscuro en la solución coloidal, y se comprobó por espectroscopia UV-Vis (Cary 60 UV-Vis Spectrophotometer, Agilent), la espectroscopia mostró las características espectrales de las AgNP con un pico en una longitud de onda de 435 nm aproximadamente. Demostrando que los compuestos fitoquímicos que se encuentran en el extracto de la cáscara de tuna “cardona” participan como agentes reductores en la síntesis y recubrimiento de nanopartículas metálicas, así como agentes estabilizantes. Se ha encontrado que los extractos acuosos de cáscara de tuna contienen ácidos fenólicos y flavonoides como: quercetina, kaempferol; algunas vitaminas como: k1, alfa-tocoferol, beta-tocoferol; y esteroides como: campesterol, lanosterol y estigmasterol, compuestos responsables del recubrimiento de las AgNP (El-Mostafa *et al.*, 2014).

Como resultado de la evaluación en la actividad antibacteriana en nanopartículas de plata biosintetizadas en extracto acuoso de cáscara de tuna, ante el patógeno *Escherichia coli*, expuesto a solución coloidal (1 ml de *E. coli* $1-3 \times 10^6$ UFC/ml, 9 ml de solución coloidal), se obtuvieron los valores mostrados en la Tabla 3, los cuales demostraron un efecto inhibitorio de la suspensión evaluada. Comparando las pruebas de efecto antibacterial en los dos tiempos de reacción (0 y 30 minutos), se observó que la suspensión presenta un efecto antibacterial con un tiempo de reacción de 30 minutos, siendo así, el tiempo necesario para alcanzar un efecto antimicrobiano. Se ha observado que el patógeno *E. coli* expuesto a concentraciones altas de AgNP presentan una disminución de azúcares reductores, que pueden inducir a la inactivación de la cadena de transporte de electrones afectando la permeabilidad de las membranas bacterianas (Liao *et al.*, 2019). Cuando las nanopartículas de plata entran en la célula bacteriana, forman una región de bajo peso molecular en el centro de las bacterias a las que se conglomeran las bacterias, protegiendo así el ADN de los iones de plata. Las nanopartículas atacan preferentemente la cadena respiratoria, la división celular finalmente conduce a la muerte celular. Las nanopartículas liberan iones de plata en las células bacterianas, lo que potencia su actividad bacteriostática (Sondi y Salopek-Sondi, 2004, Morones *et al.*, 2005).

Figura 2. Cambio de coloración característico de la síntesis de AgNP.

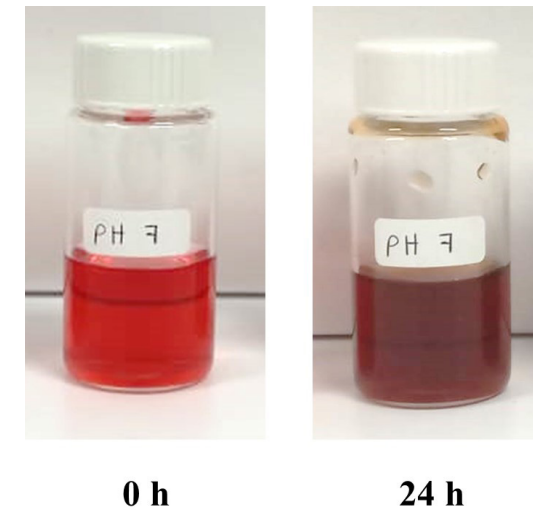


Figura 3. Efecto del plasmón de resonancia de la síntesis de nanopartículas de plata.

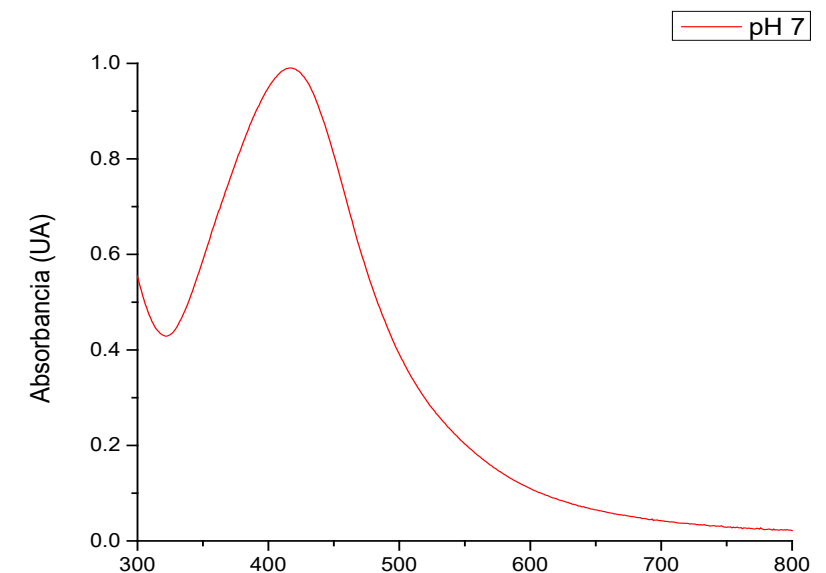
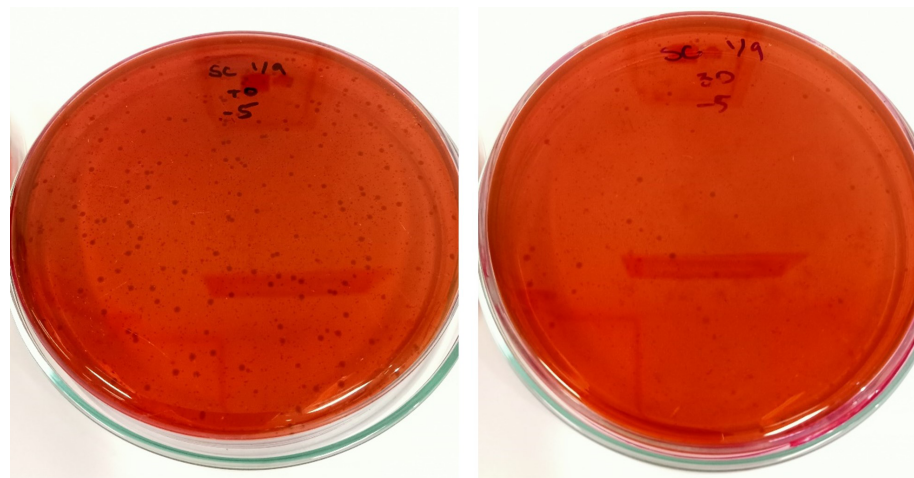


Tabla 2. Determinación de unidades formadoras de colonias (UFC/ml).

Tratamiento	Tiempo de reacción			
	0 min.	0 min.	30 min.	30 min.
Solución coloidal	180 x 10 ⁻⁶	220 x 10 ⁻⁶	72 x 10 ⁻⁶	83 x 10 ⁻⁶
	200.0 ± 28.30 x 10 ⁻⁶ (a)		77.25 ± 7.45 x 10 ⁻⁶ (b)	

Figura 4. Recuento en placa de la actividad antibacterial de las nanopartículas de plata frente Escherichia coli.



Tiempo de reacción: 0 min.

Tiempo de reacción: 30 min.

CONCLUSIONES

Las nanopartículas de plata sintetizadas de forma ecológica muestran actividad antibacterial frente a células bacterianas del género gram negativo. Para completar la caracterización antimicrobiana de las AgNP sintetizadas se podría evaluar su actividad contra bacterias gram positivas, e incluso hongos. Lo que demuestra que este método cuenta con las propiedades antibacteriales para un efecto frente a células bacterianas multirresistentes, y que a su vez presenta un potencial estabilizante y compatible con el medio ambiente, es decir, produciendo de esta manera la disminución de dicho crecimiento microbiano, de una manera segura y no contaminante.

REFERENCIAS

Ahmed, S., Saifullah, Ahmad, M., Swami, B. L., y Ikram S. (2016). Green Synthesis of silver nanoparticles using Azadirachta indica aqueous leaf extract. Journal of radiation research and applied sciences, 9(1), 1-7.

Cavassin, E. D., de Figueiredo, L. F., Otoch, J. P., Seckler, M. M., de Oliveira, R. A., Franco, F. F., Marangoni, V. S., Zucolotto, V., Levin, A. S., y Costa, S. F. (2015). Comparison of methods to detect the in vitro activity of silver nanoparticles (AgNP) against multidrug resistant bacteria. Journal of nanobiotechnology, 13, 64.

Cho, K.h., Park, J., Osaka, T. y Park, S. (2005). The study of antimicrobial activity and preservative effects of nanosilver ingredient. Electrochimica Acta, 51 (5), 956-960.

Echeverry, J., Naranjo, A., y Araque, P. (2020). Nanopartículas de plata funcionalizadas in situ con D-limoneno: efecto en la actividad antibacteriana. Revista ION, 33(1), 77-90.

El-Mostafa, K., El-Kharrassi, Y., Badreddine, A., Andreoletti, P., Vamecq, J., El-Kebbaj, M. S., Latruffe, N., Lizard, G., Nasser, B. y Cherkaoui-Malki, M. (2014). Nopal cactus (Opuntia ficus-indica) as a source of bioactive compounds for nutrition, health and disease. Molecules (Basel, Switzerland), 19(9), 14879-14901.

Franci, G., Falanga, A., Galdiero, S., Palomba, L., Rai, M., Morelli, G., y Galdiero, M. (2015). Silver nanoparticles as potential antibacterial agents. Molecules, 20(5), 8856-8874.

Kakakhel, M. A., Wu, F., Sajjad, W., Zhang Qi. (2020) Long-term exposure to high- concentration silver nanoparticles induced toxicity, fatality, bioaccumulation, and histological alteration in fish (Cyprinus carpio). Environ Sci Eur, 33,14.

Lee, S. H., & Jun, B. H. (2019). Silver nanoparticles: Synthesis and application for nanomedicine. International Journal of molecular sciences, 20(4), 865.

Liao Y.T., Salvador A., Harden L.A., Liu F., Lavenburg V.M., Li R.W. y Wu V.CH. (2019) Characterization of a Lytic Bacteriophage and an Antimicrobial Agent for Biocontrol of Shiga Toxin-Producing Escherichia coli o145 Strains. Antibiotic 8 (2):E74.

Makarov VV, Love AJ, Sinitsyna OV, Makarova SS, Yaminsky IV, Taliansky ME, Kalina NO (2014) "Green" nanotechnologies: synthesis of metal nanoparticles using plants. Acta Naturae, 6(1) 35-44.

Mathur, P., Jha, S., Ramteke, S., y Jain, N. K. (2018). Pharmaceutical aspects of silver nanoparticles. Artificial cells, nanomedicine, and biotechnology, 46(1), 115-126.

Mie, R., Samsudin, M. W., Din, L. B., Ahmad, A., Ibrahim, N., y Adnan, S. N. (2014). Synthesis of silver nanoparticles with antibacterial activity using the lichen Parmotrema praesorediosum. International journal of nanomedicine, 9, 121-127.

Morones, J. R., Elechiguerra, J. L., Camacho, A., Holt, K., Kouri, J. B., Ramírez, J.

- T., & Yacaman, M. J. (2005). The bactericidal effect of silver nanoparticles. *Nanotechnology*, 16(10), 2346–2353.
- Morones-Ramirez, J. R., Winkler, J. A., Spina, C. S., & Collins, J. J. (2013). Silver enhances antibiotic activity against gram-negative bacteria. *Science translational medicine*, 5(190), 190ra81
- Muñoz Carrillo, M., Garcidueñas-Piña, C., Valerio García, R., Carrasco-Rosales, J. L., y Morales-Domínguez, J. F. (2020). Green Synthesis of Silver Nanoparticles from the *Opuntia ficus-indica* Fruit and Its Activity against Treated Wastewater Microorganisms. *Journal of Nanomaterials*. 1-10.
- Naveed, M., Bukhari, B., Aziz, T., Zaib, S., Mansoor, M.A., Khan, A.A., Shahzad, M., Dabool, A.S., Alruways, M.W., Almalki, A.A., Alamri, A.S., Alhomrani, M. (2022). Green Synthesis of Silver Nanoparticles Using the Plant Extract of *Acer oblongifolium* and Study of Its Antibacterial and Antiproliferative Activity via Mathematical Approaches. *Molecules* 27(13) 4226. doi: 10.3390/molecules27134226
- Ovais, M., Khalil, A. T., Raza, A., Khan, M. A., Ahmad, I., Islam, N. U., Saravanan, M., Ubaid, M. F., Ali, M., y Shinwari, Z. K. (2016). Green synthesis of silver nanoparticles via plant extracts: beginning a new era in cancer theranostics. *Nanomedicine* 11(23), 3157–3177
- Ramadan, M. F. y Mörsel, J. T. (2003). Oil cactus pear (*Opuntia ficus-indica* L.). *Food Chemistry*, 82(3), 339-345.
- Reidy, B., Haase, A., Luch, A., Dawson, K. A., y Lynch, I. (2013). Mechanisms of Silver Nanoparticle Release, Transformation and Toxicity: A Critical Review of Current Knowledge and Recommendations for Future Studies and Applications. *Materials* 6(6), 2295–2350.
- Sierra-Fernández, A., Gómez-Villalba, L. S., Rabanal, M. E. y Fort, R. (2017). New nanomaterials for applications in conservation and restoration of stony materials: A review. *Materiales de construcción*, 67(325), e107.
- Silvia-de-Hoyos, L.E., Sánchez-Mendieta, V. Rico-Moctezuma, A., Vilchis-Nestor, A. R., Camacho-López, M., y Avalos-Borja, M. (2012). Silver nanoparticles biosynthesized using *Opuntia ficus* aqueous extract. *Superficies y vacío*, 25(1), 31-35.
- Singh, J., Dutta, T., Kim, K., Rawat, M., Samddar, P., y Kumar, P. (2018). ‘Green’ synthesis of metals and their oxide nanoparticles: applications for environmental remediation. *Journal of Nanobiotechnology*, 16.
- Sondi I, Salopeck-Sondi B. (2004) Silver nanoparticles as antimicrobial agent: a case study on *E.coli* as a model for Gram-negative bacteria. *J Colloid Interface Sci*, 1 177-82.

Disposición del docente del CULagos hacia la inclusión y la discapacidad

EMMANUEL ESTRADA RAMÍREZ
emmanuel.eramirez@alumnos.udg.mx

MARÍA DEL PILAR RAMÍREZ MARTÍNEZ
maria.rmartinez@academicos.udg.mx

RESUMEN

Este artículo se centra en el estudio de la disposición del docente del Centro Universitario de los Lagos (CULagos) hacia la inclusión del alumnado con discapacidad a través de la aplicación de instrumentos que permitan describir las actitudes y respuestas de los docentes a la discapacidad, ya sea que faciliten o impidan la inclusión. Este estudio fue de tipo cuantitativo —no experimental— transversal con alcance descriptivo en el cual participaron 63 docentes de los cuales 54 % fueron mujeres y 46 % hombres. Para el desarrollo de dicho estudio, se adecuó la escala de actitudes hacia la inclusión de las personas con discapacidad en la educación superior de Eva María Fernández Faúndez de la Universidad de Valladolid, dicha escala está conformada por cuatro factores: intención, actitudes, normas subjetivas y control del comportamiento percibido, se utilizó la estadística descriptiva para realizar el análisis de los resultados, finalmente, la mayoría de las dimensiones de la escala mostraron una tendencia hacia una actitud positiva, excepto, la dimensión de control del comportamiento percibido que mostró una postura neutra o ambivalente.

PALABRAS CLAVE

Diversidad (Diversity), Inclusión (Inclusion), Docente (Teacher), Discapacidad (Disability) Universidad (University).

INTRODUCCIÓN

El proyecto del que se desprende este artículo tiene como finalidad realizar un estudio sobre la disposición del docente del Centro Universitario de los Lagos a la atención a la diversidad del alumnado por medio de la aplicación de instrumentos que permitan identificar las actitudes y respuestas de los docentes a la diversidad que facilitan o impidan lograr la inclusión. En este caso en específico hacia las personas con discapacidad.

Las diferencias en educación son lo común y no la excepción, y la inclusión consiste precisamente en transformar los sistemas educativos y otros entornos de aprendizaje para responder a las diferentes necesidades de los estudiantes. La inclusión va dirigida a fomentar y crear conciencia de la diversidad de las personas en sus distintos contextos, en donde diferentes organismos políticos, sociales y educativos son actores fundamentales en el proceso de la creación de inclusión, trabajando en colaboración para crear acceso en la mayor parte de contextos en los que el ser humano puede participar y desarrollarse sin importar cuál sea la condición social, educativa, física, o si posee alguna discapacidad. Uno de los contextos más importantes para trabajar y desarrollar la inclusión se encuentran dentro de los espacios educativos.

La Organización de las Naciones Unidas (ONU) define la inclusión y asegura que “todas las personas sin distinción puedan ejercer sus derechos y garantías, aprovechar sus habilidades y beneficiarse de las oportunidades que se encuentran en su entorno” (ONU, 2018). Para lograr la inclusión, es necesario eliminar las barreras físicas, sociales y culturales que impiden el acceso a la educación, los servicios de salud, la atención social, la vivienda y otros servicios básicos.

Ahora bien, la inclusión tiene muchos beneficios para las personas con discapacidad y para la sociedad en su conjunto. Por un lado, permite a las personas con discapacidad desarrollar sus habilidades al máximo y contribuir a la sociedad como cualquier otra persona. Por otro lado, la inclusión ayuda a reducir la discriminación y la exclusión social, mejorando la calidad de vida de toda la población.

Para la Organización de las Naciones Unidas para la Educación, la Ciencia y la Cultura (UNESCO) un enfoque inclusivo de la educación significa que “se tomen en cuenta las necesidades de cada persona y que todos los educandos participen y lo logren juntos” cada alumno es tan

importante como cualquier otro, sin embargo recalca que millones de personas alrededor de todo el mundo siguen siendo excluidas de la educación por razones tales como el género, la orientación sexual, el origen étnico o social, la lengua, la religión, la nacionalidad, la situación económica o de discapacidad (2023).

Es por ello que a través de los años los organismos sociales y políticos han trabajado en pro de establecer políticas e introducir a los distintos sistemas sociales procesos que permiten el acceso al aprendizaje y la participación a la diversidad de las personas, sus condiciones y discapacidades, es por ello que la educación inclusiva ha sido uno de los pilares fundamentales para trabajar en colaboración a favor de una inclusión digna.

La escuela inclusiva acoge y adapta en su seno sin reservas a todos los candidatos, brindando una educación de calidad para fortalecer las posibilidades sociales de equidad y oportunidades de desarrollo humano equivalentes. Por tanto, debe brindar oportunidades de educación y desarrollo a todos los alumnos, los considerados alumnos típicos y aquellos que pudieran experimentar una necesidad educativa específica o alguna barrera para el aprendizaje y la participación, los que tienen recursos económicos y capitales intelectuales y sociales, como a aquellos que carecen de ellos.

La inclusión de las personas con discapacidad en la educación superior es un hecho bastante reciente y en el que se han conjugado diversos factores internos y externos a los sistemas educativos.

Aunado a esto, desarrollar una educación inclusiva conlleva la influencia de contextos y agentes protagónicos en el ámbito de la educación, siendo los docentes a través de su intervención uno de los pilares que fomentan y construyen la diversidad del alumnado universitario, para poder lograr una educación superior de calidad, esto requiere que, a través de la práctica académica se desarrollan competencias para lograr objetivos específicos.

Específicamente, en México, las personas con discapacidad comenzaron a tener una presencia más o menos constante en la demanda del nivel superior hasta principios de la década del 2000; a partir de varios factores que comenzaron a dar relevancia para tomar en cuenta la inclusión en el nivel superior, algunos de ellos principalmente educativos derivados de la promulgación de leyes y reformas para la protección de los derechos de las personas con discapacidad, el incremento en la matrícula de

estudiantes con discapacidad en niveles previos, la apertura a nuevas oportunidades para otros grupos en situación de vulnerabilidad y las propias contiendas de las personas con discapacidad y sus familias.

No obstante, no fue suficiente con el hecho de identificar la diversidad en los universitarios, sino, el trabajo y retos intrínsecos que esto conlleva, el primer acercamiento se desarrolló a través de medidas las cuales se abocaron principalmente a la accesibilidad física, de esta manera, muchas instituciones se dieron a la tarea de hacer rampas, diseñar cajones de estacionamiento, regularizar banquetas, adecuar los sanitarios, montar barandas o instalar elevadores. Sin embargo, esto no bastaría para el alcance de las necesidades específicas y sus condiciones, por lo que se tomaron una segunda generación de medidas donde la implementación de programas y unidades para la atención de los estudiantes con alguna necesidad específica sean atendidos tratando de incorporar la perspectiva de inclusión. Es así como algunas universidades de nuestro país lo han implementado.

En el estudio de Pérez (2019) y por su año de publicación, precisa los avances de normatividad y políticas institucionales solo por la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Universidad Veracruzana (UV) y la Universidad de Guadalajara (UdeG) en 2004, señalando que estas instituciones han considerado la inclusión de las personas con discapacidad en sus planes de desarrollo, aunque con diferencias significativas. En la UNAM, por ejemplo, el Plan de Desarrollo Institucional vigente lo incluye en el eje de Derechos Humanos y Equidad de Género. En la UV el Plan General de Desarrollo 2025 incluye esta temática como parte de sus programas genéricos, sin explicar el sentido de sus políticas o acciones, mientras que en la UdeG con el Plan de Desarrollo 2014-2030 plantea como parte de la misión y visión institucional lograr una institución incluyente, equitativa y promotora de la movilidad social.

Si bien cada centro de educación superior ha dado a conocer a través de estas unidades o de sus páginas web el trabajo que han hecho hacia la inclusión, diversas investigaciones han identificado las grandes diferencias que existen entre los programas Cruz y Casillas (2017) identificaron que algunos están dirigidos a determinados tipos de discapacidad, otros sólo otorgan ciertos apoyos, y otros más se enfocan en la realización de ajustes razonables para la accesibilidad, por su parte Jacobo (2017) destaca la diversidad de información que se puede encontrar en las páginas web

institucionales, así como la variedad de profesionales que fungen como responsables institucionales de los programas.

La Universidad de Guadalajara es una de las instituciones más importantes en Educación Superior en el Estado de Jalisco. Está organizada con una estructura que comprende una Administración General, seis Centros Universitarios Temáticos (Centro Universitario de Arte, Arquitectura y Diseño CUAAD, Centro Universitario de Ciencias Biológicas y Agropecuarias CUCBA, Centro Universitario de Ciencias Económicas y Administrativas CUCEA, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías CUCEI, Centro Universitario de Ciencias de la Salud CUCS y el Centro Universitario de Ciencias Sociales y Humanidades CUCSH), nueve Centros Universitarios Regionales (Centro Universitario de los Altos CUALTOS, Centro Universitario de la Ciénega CUCIENEGA, Centro Universitario de la Costa CUCOSTA, Centro Universitario de la Costa Sur CUCSUR, Centro Universitario de los Lagos CULAGOS, Centro Universitario del Norte CUNORTE, Centro Universitario del Sur CUSUR, Centro Universitario de los Valles CUVALLES y Centro Universitario de Tonalá CUTONALÁ), además del Sistema de Universidad Virtual (SUV) y el Sistema de Enseñanza Media Superior (SEMS).

Estos 15 centros universitarios atienden la demanda de educación superior en Jalisco, desarrollan la investigación científica y tecnológica y prestan servicios en base a los requerimientos sociales específicos, además se suma la oferta académica que brinda el Sistema de Universidad Virtual (SUV), La demanda de bachillerato en sus diversas modalidades se atiende a través de todas las escuelas preparatorias.

El Centro Universitario de los Lagos es uno de los Centros Regionales que componen la Red de la Universidad de Guadalajara, con sede en Lagos de Moreno y San Juan de los Lagos, en la zona Altos Norte de Jalisco. Donde genera y aplica conocimiento a través de la investigación científica, tecnológica y humanística de alto nivel. A partir de ello, forma integralmente profesionistas y científicos en ambientes de aprendizaje innovadores, propiciando experiencias de movilidad y multilingüismo.

Forma ciudadanos con una perspectiva sin fronteras, al ofrecer un ambiente académico basado en la investigación, centrado en el estudiante y el análisis crítico, orientado por el liderazgo, el humanismo y el compromiso social, respetando la biodiversidad y la dignidad humana. Como principios centrados en su visión, el CULagos hace una premisa hacia una de los pilares

primordiales en la educación y la formación en los docentes y estudiantes pertenecientes a dicho centro de estudios universitarios.

El alcance social y educativo del CULagos es significativo debido a que es un destino de formación multidisciplinar consolidado para estudiantes universitarios de ocho municipios de la región Altos Norte, así como de otros 50 municipios del estado y 26 de los 32 estados de la República (Hernández, 2023) lo que significa que su alcance académico es significativo y de gran extensión para estudiantes universitarios y contar con un número considerable de docentes ejerciendo profesionalmente.

Cuenta hasta 2023, con una planta académica de 91 profesores de Tiempo Completo, 4 profesores de medio tiempo, 27 técnicos académicos, 136 de asignatura (42 de categoría “A” y 94 de categoría “B”) y 17 de horas definitivas. De la planta académica, 79 académicos cuentan con el grado de doctor, 111 con el grado de maestría y 85 con el grado de licenciatura. Al considerar solo los PTC, el 98 % cuenta con estudios de posgrado y si se considera a todos los académicos, el 69 % cuenta con posgrado, de acuerdo a los datos señalados en el primer informe de actividades de la rectora de este Centro Universitario.

Así mismo, refiere que “los esfuerzos de inclusión son importantes en el CULagos, pues aun a tres años de distancia del inicio de la pandemia, se continúan observando vulnerabilidades importantes en ciertos sectores de estudiantes del CULagos”, esto impulsa analizar los trabajos realizados por parte del centro universitario en materia de inclusión para la detección y fortalecimiento de posibles necesidades en la población de estudiantes universitarios (2023).

La Universidad de Guadalajara en su Plan de Desarrollo Institucional 2019-2025 visión a 2030, incluye un apartado esencial referente a una Estrategia Institucional para la Inclusión. A partir de ello, se propone fortalecer las estrategias institucionales de inclusión y equidad educativa a través de:

- Mejorar y ampliar los programas estratégicos para el desarrollo cultural de la institución, promoviendo y socializando la equidad de género, el respeto a la diversidad étnica y la inclusión.
- Impulsar un código de ética universitaria que incorpore los valores del respeto al ser humano y al medio ambiente, tolerancia, equidad, no discriminación y no acoso escolar, entre otros.

- Generar una política integral y transversal de equidad y fomento a la no discriminación, en todas sus manifestaciones, que equilibre las condiciones y las oportunidades institucionales y el acceso libre a la infraestructura física para todos los universitarios.
- Generar políticas para asegurar que los estudiantes pertenecientes a grupos vulnerables tengan éxito en su trayecto escolar (UDG, 2019).

A partir de este planteamiento la UDG con el objetivo de brindar a todos los estudiantes condiciones equitativas de aprendizaje, independientemente de sus antecedentes sociales, culturales y de sus diferentes habilidades y capacidades, aprobó la Política Institucional de Inclusión, del que surge el Programa Institucional de Inclusión que apoya a distintos grupos vulnerables, entre los cuales, se encuentra la población con discapacidad. Esta política está gestionada por una de las coordinaciones incorporadas más importantes e influyentes dentro de la Universidad, la cual es la Coordinación General de Extensión y Difusión Cultural, dependencia encargada de coordinar, asesorar y apoyar las políticas institucionales en materia de extensión, acción social, inclusión, atención a las comunidades indígenas, servicio social y perspectiva de género; así como de difusión cultural y promoción artística. La creación de esta política, bajo su objetividad, atendió en virtud de diversos antecedentes difundidos por diversos organismos tanto nacionales como internacionales, que promueven e impulsan el trabajo social hacia una educación y una sociedad más inclusiva (2019).

En función de analizar diversos antecedentes, la UdeG ha desarrollado múltiples programas e iniciativas para fortalecer la inclusión para toda la Red Universitaria con base a diversos resoluciones a través de una visión más objetiva a partir de la creación de dicha política, conforme a la “accesibilidad, acción afirmativa, ajustes razonables, derechos a la identidad de género, desigualdad social, discriminación, discriminación por motivos de discapacidad, educación inclusiva, estigma, género, inclusión e igualdad de oportunidades”, así como desplegar estrategias, lo que permitió tener una estructura definida, para dar respuesta a las necesidades de la población estudiantil (2019).

El Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI) en su último censo, presenta que el porcentaje total de personas con discapacidad en

nuestro país corresponde al 5.69 % (7' 169, 178). De estas, 5' 577, 793 siendo el porcentaje más alto con el 78 % tienen únicamente discapacidad, seguido del 10 % que tiene algún problema o condición mental, el 8 % además de algún problema o condición mental tienen discapacidad y con el porcentaje más bajo con el 4 % reportan tener algún problema o condición mental y una limitación (2020).

Jalisco, por su parte, a través del Instituto de Información Estadística y Geografía de Jalisco (IIEG) reporta que en el estado hay 1' 264, 817 personas con discapacidad, las cuales representan el 15.2 % de la población total del estado. Esto permite tener un panorama más amplio ante dicha situación, sin embargo, es pertinente delimitar la población por rangos de edad, los niños y niñas (0 a 14 años) representan un total de 13 % (899 mil) y las personas jóvenes (15 a 29 años) representan el 12 % (869 mil). A través de los años, los trabajos e investigaciones en pro de formar espacios, físicos, sociales y de participación han ido a la alza, ayudando a precisar técnicas y estrategias que han reforzado los sistemas sociales, políticos y educativos en la eliminación de barreras para el aprendizaje y la participación (BAP) que afectan directamente a dicha población (2021).

La población joven y adulta cuenta con un porcentaje considerable que presenta alguna condición mental o discapacidad en México, por lo que es pertinente el analizar desde el contexto educativo; cuánta participación académica existe y como los sistemas educativos, que en este caso se considera el nivel superior trabajan tanto profesional como personalmente hacia las personas con discapacidad.

En México la población sin discapacidad que no tiene ningún grado escolar corresponde al 5 % de la población total, mientras que para la población con discapacidad este porcentaje se multiplica casi por cuatro representando al 19.7 % del total de personas con discapacidad, Gómez y colaboradores en su investigación sobre el Nivel de Estudios de la Población con discapacidad señalan que para el caso específico de la educación universitaria profesional, sólo accede el 4.9 % de la población con discapacidad, mientras que dicho porcentaje sube al 12.6 % en el caso de las personas sin discapacidad (2022). Por lo que, es de señalarse la baja participación de las personas con discapacidad en el caso de los grados de maestría y doctorado. En efecto se ha identificado que la población con discapacidad que alcanza grados de educación superior en México presenta una diferencia

considerable respecto a las personas sin discapacidad, siendo tan solo el 9.8 % de la población total.

Tomando en cuenta el tamaño de las poblaciones por tipo de discapacidad en México, es posible destacar que los porcentajes más altos de participación en el total de egresados de carreras profesionales es el de las personas con discapacidad motriz, 45 %, seguidas de las limitaciones visuales 30 %. Esta proporción se mantiene en el caso de las maestrías 51 % y 33 % y del doctorado 63 % y 35 % respectivamente (2022).

La UdeG brinda servicios académicos a 4 mil estudiantes con discapacidad visual, auditiva, motriz y psicosocial en el Sistema de Educación Media Superior (SEMS) y de nivel superior, y avanza con la sensibilización de la comunidad académica para eliminar las barreras físicas y de actitud que enfrentan los universitarios con discapacidad.

MATERIALES Y MÉTODOS

La selección de los participantes se realizó a través de un muestreo no probabilístico incidental siendo una muestra por conveniencia, dando la posibilidad de participar de manera voluntaria y solicitando el apoyo de la secretaría académica y los jefes de departamentos para la distribución del instrumento en formato de formulario de Google, apoyando al cumplimiento del único criterio de inclusión que fue ser docente universitario exclusivamente del Centro Universitario de los Lagos, ya que es el espacio al cual va dirigido el objetivo o finalidad del estudio.

Antes de iniciar el instrumento se proporcionó la información referente a la finalidad del estudio, así como su objetivo, además de señalar que la participación era libre y voluntaria, y que la información que se proporcionará sería confidencial obteniendo así el consentimiento informado. Si alguien no estuviera de acuerdo, al llegar a este punto podría decidir no contestar el instrumento. Se hizo uso de la estadística descriptiva, específicamente las medidas de tendencia central para realizar la interpretación de los resultados obtenidos.

Este estudio fue de tipo cuantitativo, no experimental, transversal con alcance descriptivo en el cual participaron 63 docentes universitarios del Centro Universitario de los Lagos, de las dos divisiones y los 4 departamentos, organizados de la siguiente manera: 54 % mujeres y 46 % hombres, de los cuales el 65.1 % pertenecen a la División de Estudios de

la Cultura Regional y el 34.9 % restante a la División de Estudios de la biodiversidad e Innovación Tecnológica.

En relación a la participación por Departamentos la representatividad se mostró de la siguiente manera: un 41.3 % de los docentes participantes pertenecen al Departamento de Humanidades, Artes y Culturas Extranjeras, 28.6 % al Departamento de Ciencias Exactas y Tecnología, 25.4 % al Departamento de Ciencias Sociales y del Desarrollo Económico y un 4.8 % al Departamento de Ciencias de la Tierra y de la Vida.

Del total de participantes, 32 cuentan con escolaridad a nivel maestría representando el porcentaje mayor (50.8 %), 19 con estudios de doctorado (30.2 %), 10 con licenciatura (15.9 %) y 2 con estudios de postdoctorado (3.2 %).

El único criterio de inclusión fue ser docente universitario, específicamente del Centro Universitario de los Lagos, en búsqueda de facilitar y cumplir con el objetivo y finalidad de la investigación.

El instrumento utilizado fue la Escala de Actitudes hacia la inclusión de las personas con discapacidad en la Educación Superior, el cual consta de 41 ítems organizados en 4 dimensiones: Actitudes, Normas Subjetivas, Control del Comportamiento Percibido e Intención creado y validado por Eva María Fernández Faúndez de la Universidad de Valladolid. Dicho instrumento tiene como sustento teórico la Teoría de la Conducta Planificada y tiene un formato de respuesta de tipo likert de seis puntos para cada dimensión marcado de acuerdo a las características particulares de cada una de ellas.

1. Intención: 1. Totalmente en desacuerdo (TDS); 2. Bastante en desacuerdo (BD); 3. Algo en desacuerdo (AD); 4. Algo de acuerdo (AA); 5. Bastante de acuerdo (BA); y 6. Totalmente de acuerdo (TA).
2. Actitudes: 1. Totalmente improbable (TI); 2. Bastante improbable (BI); 3. Algo improbable (AI); 4. Algo probable (AP); 5. Bastante probable (BP); 6. Totalmente probable (TP).
3. Normas Subjetivas: 1. Nada (N); 2. Casi nada (CN); 3. Poco (P); 4. Algo (A); 5. Bastante (B); 6. Mucho (M).
4. Control del Comportamiento Percibido: 1. Totalmente en desacuerdo (TDS); 2. Bastante en desacuerdo (BD); 3. Algo en desacuerdo (AD); 4. Algo de acuerdo (AA); 5. Bastante de acuerdo (BA); 6. Totalmente de acuerdo (TA).

Además de los indicadores que componen la escala, se solicitó información que se considera de utilidad para la investigación para poder facilitar el análisis de la misma. Los todos solicitados incluyen: edad, sexo/género (1. Hombre, 2. Mujer, y 3. Otro), escolaridad (1. Licenciatura, 2. Maestría, 3. Doctorado Y 4. Postdoctorado). Se incluyeron también las siguientes preguntas: ¿Tienes algún tipo de contacto con personas con discapacidad? (1. Sí, 2. No); en caso de tener contacto con personas con discapacidad señalar la razón (1. Familiar; 2. Compañero/a de estudios; 3. Laboral; 4. Asistencial; 5. Ocio/amistad; 6. Otras razones), la frecuencia (1. Casi permanente, 2. Habitual, 3. Frecuente, 4. Esporádica) y el tipo de discapacidad de las personas con las que tiene contacto (1. Física, 2. Auditiva, 3. Visual, 4. Intelectual, 5. Múltiple).

RESULTADOS

Además de los indicadores que componen cada dimensión se solicitó información adicional que se considera de utilidad para la investigación, los datos solicitados se refieren a si se tiene contacto con personas con discapacidad, en la que un 69.8 % mencionan sí tenerlo y un 30.2 % no tenerlo, la razón por la cual tienen o han tenido ese contacto en su mayoría no se especificó, 42.9 % (27 docentes), por lo que se señaló la opción de otras razones, continuando con un 27 % (17) que tienen o han tenido el contacto con una persona con discapacidad por razones familiares, el 15.9 % (10) por razones laborales, el 12.7 % (8) por razones de ocio o amistad y un 1.6 % (1) por razones asistenciales. La frecuencia del contacto casi permanente se presenta en solo el 7.9 % de los casos, de manera habitual el 15.9 %, de manera frecuente, el 14.3 %, esporádica el 42.9 %, y nunca un 19 %.

A su vez, el tipo de discapacidad de las personas con las que tiene contacto es en su mayoría física o motriz con un 31.7 %, múltiple un 15.9 %, intelectual 12.7 %, visual solo el 6.3 % y auditiva el 3.2 %.

Los resultados se analizaron por medio de estadística descriptiva en concordancia con el alcance elegido para este estudio, el análisis se realizó tanto por dimensiones como por la totalidad de la escala, por lo tanto, los resultados se mostraran en ese orden. Para facilitar el análisis se realizó una escala de clasificación y determinación de la actitud hacia los extremos negativa o positiva.

La primera dimensión del instrumento es la intención la cual hace referencia a la motivación a una acción o comportamiento, por lo tanto, hacia esta se dirigen las otras tres dimensiones siguientes: las actitudes, normas subjetivas y control del comportamiento percibido.

En todas las dimensiones el puntaje mínimo es 1, ya que este se definió como punto de partida de acuerdo al instrumento que se responde en un escala del 1 al 6. En particular la primera dimensión que es la intención está compuesta por 12 indicadores, por lo tanto el puntaje máximo es 72, y de acuerdo a las respuestas obtenidas se tiene una media de 61.61, la mediana es 64 y la desviación estándar de 11.46. De acuerdo a estos valores, a través de la media se puede señalar que los docentes del CULagos manifiestan una intención positiva hacia la inclusión de estudiantes o personas con discapacidad en su universidad. Además la desviación estándar indica que los datos no se encuentran dispersos, por lo cual la mayoría muestra la misma actitud positiva.

La dimensión de actitudes evalúa la valoración favorable o desfavorable hacia el comportamiento y se compone de 11 indicadores, por lo tanto la puntuación máxima para esta dimensión es 66, y se tuvieron los siguientes datos: una media de 56.42 y una desviación estándar de 9.59, a través del valor de la media se puede decir que los docentes del CULagos tienen una actitud positiva hacia la inclusión de estudiantes y personas con discapacidad y la desviación estándar muestra que los datos no se encuentran dispersos, lo cual significa que la mayoría tiene una actitud positiva.

La tercera dimensión son las normas subjetivas referidas a las creencias de las normas sociales tanto propias como de la demás personas y que pueden facilitar o no el llevar a cabo una conducta, en el caso de este estudio es la inclusión. El puntaje máximo en esta dimensión es de 54. Los datos obtenidos en esta dimensión fueron la media con un valor de 43.15 y la desviación estándar de 4.3. Por lo que a través de la media se observa que las normas subjetivas son percibidas de forma positiva y al presentarse una desviación estándar mínima se manifiesta que la mayoría de los docentes tienen normas subjetivas positivas.

El control de comportamiento percibido es la cuarta y última dimensión de la escala utilizada, esta al igual que la anterior tiene un puntaje máximo de 54 al estar compuesta por sólo 9 indicadores. Los resultados obtenidos fueron una media de 35.87, con una desviación estándar de 5.84. Lo que a

diferencia de los resultados de las demás dimensiones se interpreta como una postura neutra o ambivalente. Interpretándose como el no saber si la inclusión y las acciones que pudieran llevar a cabo serían fáciles o difíciles.

En cuanto a las puntuaciones totales de la escala el puntaje mayor esperado es de 246, del que de acuerdo al análisis de los resultados se presenta una media de 197.07 y una desviación estándar de 23.7, interpretando nuevamente y de manera general como positiva sin mostrar dispersión de los datos.

CONCLUSIONES

Tanto las actitudes (disposición o voluntad hacia el comportamiento), las normas subjetivas (creencias tanto propias como de los demás sobre las normas sociales) el control de comportamiento percibido (creencia sobre la facilidad o dificultad para llevar a cabo una acción o comportamiento específico) y la intención, a la que abonan las anteriores para motivar el deseo de realizar una acción se han determinado como positivas en los docentes del CULagos, dejando de manifiesto ese interés para poder proporcionar y facilitar la inclusión de los estudiantes y personas con discapacidad en la universidad, específicamente en el Centro Universitario donde laboran.

Es importante señalar también que en ninguna dimensión ni en la escala total se llegó al último y nivel más alto donde se señala una postura completamente positiva, lo que se puede interpretar como que no todo está terminado ni concluido, todavía se puede mejorar, y por lo tanto se rescata que la intención de hacerlo es alta, aunque el control del comportamiento percibido aún es ambivalente, es decir, falta certeza sobre si lo que se hace o se considera saber hacer como docente es lo correcto o no para favorecer la inclusión.

Este estudio se limitó al análisis descriptivo atendiendo a diversos factores tales como el tiempo de realización, al ser limitado al verano de investigación del CULagos, sin embargo, el análisis puede ampliarse y definir otros tipos y alcances haciendo uso de los datos recabados en el instrumento utilizado.

REFERENCIAS

- Cruz, R. y Casillas, M. (2017). Las instituciones de educación superior y los estudiantes con discapacidad en México. *Revista de la Educación Superior*, 46(181), 37-53.
- Fernández, M. (2018) Actitudes hacia la inclusión de universitarios con discapacidad: Desarrollo y validación de una escala basada en la Teoría de la Conducta Planificada. *Electronic Journal of Research in Educational Psychology*, 16(1), 199-122.
- Gómez, W. y Moctezuma, A. M, A. (28 de febrero de 2022). *Nivel de estudios de la población con discapacidad*. Bindi .<https://obindi.org/trabajos/investigaciones/nivel-de-estudios-de-la-poblacion-condiscapacidad>
- Hernández, G. A. (24 de abril de 2023). *Primer Informe de Actividades Centro Universitario de los Lagos*. Centro Universitario de los Lagos. <https://lagos.udg.mx/informes/2022/>
- INEGI. (03 de diciembre de 2020). *Estadísticas a propósito del Día internacional de las personas con discapacidad*. <https://www.inegi.org.mx/app/salaDeprensa/noticia.html?id=6991>
- IIEG. (2021). *Día internacional de las personas con discapacidad*. [Archivo PDF] <https://iieg.gob.mx/ns/wp-content/uploads/2021/12/D%C3%ADaPobDiscapacidad2021.pdf>
- Jacobo, Z. (2017). Pautas para la investigación sobre inclusión en la educación superior. [Conferencia]. II Seminario sobre Discapacidad y Educación Superior. IISUE, UNAM. Ciudad de México.
- ONU. (12 de diciembre de 2018). *Inclusión social, económica y política de las personas mayores*. Cepal.org. <https://www.cepal.org/es/enfoques/inclusion-social-economica-politica-personas-mayores>
- Pérez, J. (2019). La inclusión de los estudiantes con discapacidad en dos universidades públicas mexicanas. *Innovación educativa*, 19(79), 145-170.
- UNESCO. (13 de marzo de 2023). *Qué debe saber acerca de la inclusión en la educación*. U. <https://www.unesco.org/es/inclusion-education/need-know>
- Universidad de Guadalajara. (2019). Plan de Desarrollo Institucional 2019-2025 visión 2030. <http://www.udg.mx/es/PDI>

Rendimiento de aceite esencial de lavanda utilizando diferentes métodos de extracción

JONATHAN HERNANDEZ MEJÍA

jonathan.hernandez7419@alumnos.udg.mx;

ALEXA DEL ROSARIO AGUIÑAGA GUERRERO

alexa.aguinaga7406@alumnos.udg.mx

NICOLÁS ULLOA GÓMEZ

nicolas.ulloa7412@alumnos.udg.mx

XOCHITL APARICIO FERNÁNDEZ

xochitl.aparicio@academicos.udg.mx

RESUMEN

Lavandula dentata es una planta originaria del mediterraneo, leñosa, con hojas aromáticas y flores de tonalidad violeta. Su carácter ornamental la hace popular en jardines que requieren de podas constantes produciendo flores como residuo, por lo que en este proyecto se buscó el aprovechamiento de éstas para la obtención de sus aceites esenciales.

La extracción de aceites esenciales tradicionalmente se realiza mediante destilación por arrastre de vapor, por lo que se propuso realizar la comparación, en cantidad y composición de los aceites obtenidos, con tres técnicas propuestas de acuerdo a la disposición de equipos y materiales con que se cuenta en los laboratorios del CULagos: Hidrodestilación con infusión, Hidrodestilación con solución de NaCl, Hidrodestilación asistida con ultrasonido. Se utilizó la espectroscopía infrarroja (IR) para detectar la presencia de los componentes en los aceites obtenidos con los esperados de acuerdo a la información bibliográfica y en comparación con el aceite esencial de *L. angustifolia*, la especie más utilizada en la extracción comercial. Los espectros IR de los hidrolatos obtenidos con las diferentes técnicas empleadas muestran diferencias importantes.

Sobresale en el espectro del hidrolato obtenido con tratamiento de infusión con NaCl la presencia de una mayor cantidad de señales de absorbancia con números de onda correspondientes a los principales compuestos de *L. dentata*, algunos presentes también en el espectro de *L. angustifolia*. Las variaciones en las técnicas propuestas indujeron al enriquecimiento de nuevos conocimientos y mejoras en las operaciones unitarias aplicadas en el laboratorio; además tuvimos la oportunidad de hacer uso de herramientas de análisis instrumental, una de las áreas más importantes en ingeniería bioquímica.

PALABRAS CLAVE

Destilación (Distillation), Aceite Esencial (Essential Oil), Volátil (Volatile), Espectroscopía infrarroja (Infrared spectroscopy), Hidrolato (Hydrolate).

INTRODUCCIÓN

Los aceites esenciales son una mezcla de terpenos, sustancias aromáticas y volátiles; son responsables del olor y sabor de algunas plantas. Son aceites no saponificables con diferentes grupos funcionales como alcoholes, aldehídos, cetonas, ésteres y éteres que se encuentran almacenados en los tricomas presentes en la epidermis de la planta en cantidades muy pequeñas, tanto en el tallo como en las inflorescencias. En estas últimas, los tricomas son glandulares, pluricelulares y tienen un carácter secretor, mientras que en el tallo cumplen específicamente con una función reguladora de la temperatura interna de los tejidos.

Los aceites esenciales son altamente valorados por sus diversas propiedades terapéuticas tales como relajantes y sedantes, antimicrobianos, antiinflamatorios, hipotensores, entre otros. De forma general, el contenido de aceites esenciales en las plantas es bastante bajo, menor al 2 %, por lo que se requiere de una gran cantidad de plantas para obtener el aceite puro, generando un elevado costo en su comercialización. El aceite esencial de lavanda es uno de los más valorados a nivel comercial, siendo la especie *Lavandula angustifolia* la más empleada para su extracción por presentar un mayor contenido de éste en su flor, en promedio entre 0.2 y 0.7 %. El aceite esencial de *L. angustifolia* se caracteriza por su alto contenido de linalool y acetato de linalilo, compuestos que le otorgan un aroma suave y floral. Además, contiene otros componentes como el *cis* β -ocimeno,

terpinen-4-ol, cariofileno, acetato de lavandulilo, derivados terpénicos, alcoholes terpénicos libres, alcanfor, borneol, eucaliptol, entre otros.

En este proyecto se trabajó con *L. dentata* una de las sesenta especies del género *Lavandula*, todas con propiedades y composición química diferentes. *L. dentata* es una planta perenne, aromática, de crecimiento erguido y con una gran ramificación con flores lilas en las puntas. La base del tallo lignificado y las hojas opuestas con “dientes” contorneados son las principales características visuales de identificación. El aceite esencial de *L. dentata* tiene una composición química ligeramente diferente al de *L. angustifolia*, con una mayor concentración de cineol y alcanfor que le confiere un aroma más fresco y herbáceo. Las propiedades medicinales y terapéuticas de esta planta están relacionadas, justamente, con la presencia de estos monoterpenos oxigenados, 1,8-cineol y alcanfor, que le otorgan una acción antiespasmódica, antifúngica y bactericida. Además, por la presencia de linalool y acetato de linalilo (moléculas sedantes y con propiedades positivas en el estado de ánimo) ha tenido una alza en su uso. Por su carácter ornamental, *L. dentata* es popular en jardines que requieren podas constantes, produciendo como residuo partes de la planta (incluyendo inflorescencias) que contienen aceites esenciales. El objetivo del presente proyecto fue el aprovechamiento del residuo de la poda *L. dentata* de jardines residenciales de la ciudad de Lagos de Moreno para la extracción de sus aceites esenciales, utilizando equipos y materiales con los que se cuenta en los laboratorios del CULagos. La pregunta de investigación que se buscó responder es ¿Cuál de los métodos propuestos obtendrá mejores resultados?

Debido al muy bajo rendimiento del aceite esencial de *L. dentata* y con el objetivo de detectar la presencia de los componentes principales en el hidrolato extraído, se empleó la espectrometría infrarroja (IR) como análisis cualitativo, esto debido a que esta técnica es útil para caracterizar ciertos componentes de los aceites esenciales al detectar las vibraciones entre átomos de grupos funcionales característicos, de manera que cada espectro es específico para un compuesto en particular.

MATERIALES Y MÉTODOS

El trabajo de investigación se llevó a cabo en el Centro Universitario de los Lagos, donde se adaptaron los sistemas investigados a las condiciones de

los laboratorios de Bioquímica y Alimentos. Se utilizaron solamente flores frescas podadas la noche anterior a cada extracción, obtenidas de un jardín de una zona residencial, destacando que además de las inflorescencias se utilizó la mitad de su tallo.

Se buscó utilizar principalmente aquellas flores que presentaban una coloración intensa con la intención de recolectar la mayor cantidad de aceites, puesto que la pérdida de coloración indica la volatilización, pérdida o alteración de algunos componentes del mismo.

DESTILACIÓN POR ARRASTRE DE VAPOR

Esta técnica es comúnmente la más utilizada para la extracción de aceites esenciales y se fundamenta en el hecho de que los aceites esenciales, al entrar en contacto con el vapor de agua, se volatilizan por acción de la alta temperatura y salen de los tricomas glandulares. Al mismo tiempo son arrastrados por el vapor hasta el refrigerante, donde se condensan. Esta técnica se realizó utilizando una olla de presión de 6 L con 1000 ml de agua destilada, sobre la cual se colocó una rejilla y sobre ésta se dispuso 100 g de lavanda. La olla se selló y se conectó la válvula de escape a una manguera, que a su vez estaba conectada a un refrigerante con sistema de enfriamiento. La extracción se llevó a cabo en la estufa a intensidad media, durante 1 hora.

HIDRODESTILACIÓN CON INFUSIÓN

Durante la infusión los aceites esenciales salen de los tricomas glandulares, debido a la ruptura celular y por acción del calor. Dado que existe un aporte continuo de calor, el vapor generado facilita el arrastre de los aceites para después ser condensados en el refrigerante. Para esta técnica, se introdujeron en agua hirviendo 100 g de flores frescas de *L. dentata* con agua destilada durante 30 minutos. Posteriormente, se realizó una hidrodestilación utilizando una olla de presión de 6 L, teniendo como total 1.2 L de agua destilada, la olla fue sellada y conectada a un refrigerante. El fuego se mantuvo a intensidad media durante 1 hora.

HIDRODESTILACIÓN CON SOLUCIÓN DE NaCl

El uso de una solución sobresaturada de cloruro de sodio para la extracción de aceites esenciales tiene dos efectos: la plasmólisis de las células de

los tricomas glandulares, que libera los aceites en el medio acuoso; y la reducción de la constante dieléctrica del agua, lo cual a su vez disminuye su capacidad para solubilizar los aceites esenciales, facilitando su arrastre por acción del vapor durante la destilación. Esta técnica se realizó de forma similar a la de hidrodestilación con infusión, sustituyendo el agua por 1.2 L de solución sobresaturada de cloruro de sodio.

HIDRODESTILACIÓN ASISTIDA POR ULTRASONIDO

El pretratamiento ultrasónico causa cavitación en el líquido, a la vez que las ondas penetran el material vegetal; lo que favorece la ruptura celular ayudando a extraer el aceite rápida y eficazmente, la hidrodestilación aplicada al material sonicado volatiliza los aceites esenciales hacia un refrigerante donde son condensados. Para aplicar esta técnica, se colocaron 33.33 g de flor de lavanda fresca y 50 ml de agua en un matraz de 250 ml tapado. El matraz se colocó en un baño ultrasónico (marca, modelo, país del equipo) a una potencia de 200W/L durante 10 min. Esto se realizó por triplicado para tener 100 g de flores con pretratamiento ultrasónico. El extracto total y las flores, fueron llevados a una olla de presión, se agregaron 1.2 L de agua destilada, y se hidrodestiló por calentamiento durante 1 h.

ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

Los hidrolatos obtenidos de cada técnica fueron analizados mediante espectroscopía infrarroja a través del espectrómetro IR Frontier de la marca PerkinElmer en el medio infrarrojo (MIR) para caracterizar el aceite y compararlo con los datos bibliográficos de los compuestos presentes en aceites esenciales de lavanda y con el aceite comercial de *L. angustifolia*.

RESULTADOS

Las características observadas en los hidrolatos obtenidos por las diferentes técnicas de extracción propuestas presentan distintas características. Lo primero que se observó fue que la cantidad de hidrolato obtenido era diferente en cada caso; en la destilación por arrastre de vapor se obtuvieron 300 ml, 350 ml en el caso de la hidrodestilación con infusión, en la hidrodestilación con solución sobresaturada de NaCl y en la asistida por ultrasonido el volumen obtenido fue de 340 ml. En todos los casos, el tiempo de destilación fue de 1 hora. Las técnicas de hidrodestilación generan un mayor volumen

de destilado, mientras que el arrastre de vapor fue un poco menor debido a que se usó una menor cantidad de agua. Otra diferencia importante fue en las características organolépticas y físicas de los hidrolatos obtenidos; en la Tabla 1 se muestran algunas características de los destilados.

Tabla 1. Características organolépticas de los hidrolatos de *L. dentata*

Método	Aroma	Visual
Destilación por arrastre de vapor	Fragancia intensa, Herbacea y Mentolada.	Turbio-lechoso con una cantidad moderada de gotas aceitosas en su superficie
Hidrodestilación con infusión	Fragancia suave, de baja intensidad, con notas herbáceas.	Turbio-lechoso con una cantidad muy baja de gotas aceitosas en su superficie
Hidrodestilación con solución sobresaturada de NaCl	Fragancia intensa, floral, herbácea y mentolada.	Turbio-lechoso con una gran cantidad de gotas aceitosas en la superficie
Hidrodestilación asistida con ultrasonido	Aroma moderado, con fragancia herbácea.	Un poco turbio-lechoso sin gotas aceitosas perceptibles en su superficie

Dado que la cantidad de aceite volátil extraído en los hidrolatos fue muy pequeña, y que no se logró separar por métodos físicos (centrifugación, decantación) ni químicos (extracción con disolventes), se optó por analizar cada uno de los hidrolatos mediante espectrometría infrarroja para su comparación cualitativa. Los espectros IR se compararon con los correspondientes a cada componente principal del aceite esencial de lavanda (linalool, acetato de linalilo, 1, 8-cineol, alcanfor) que son característicos y presentan bandas de absorción típicas en números de onda determinados de acuerdo a los grupos funcionales que poseen, como se muestra en la Tabla 2. Por lo que la presencia de dichos picos en el espectro de los hidrolatos obtenidos sugiere la presencia de los componentes volátiles.

Tabla 2. Grupos funcionales presentes en los compuestos más abundantes del aceite esencial de *L. dentata*

Componente	Grupos funcionales
Linalool	OH(secundario), CH3 Metil, C=C, =C-H, C-H
Alcanfor	Cetona, CH3, Biciclo (2.2.1) Heptano
Acetato de linalilo	Acetato (enlaces C=O y C-O-C) C=C
1,8-cineol	CH3, Éter puenteado, hexano
δ-Terpineol	OH(terciario), CH3 Metil, C=C aromático, C=C
Fenchona	Cetona, CH3, Biciclo (2.2.1) heptano,

Figura 1. Estructuras moleculares de los compuestos más abundantes presentes en el aceite esencial de *L. dentata*

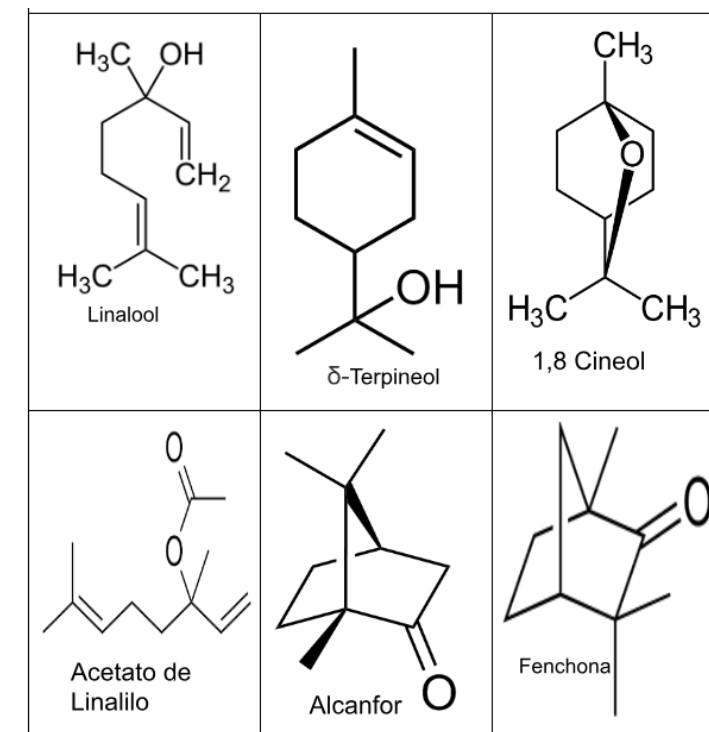
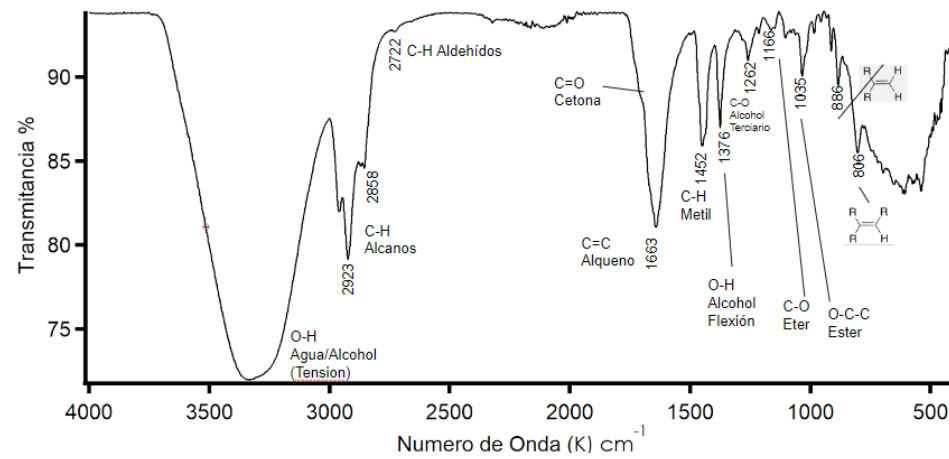


Figura 2. Espectro infrarrojo del hidrolato de *L. dentata* obtenido de la destilación por arrastre de vapor



En la figura 2 se muestra el espectro del hidrolato obtenido de la destilación por arrastre de vapor; se identificaron las bandas de absorción típicas de los componentes principales de *L. dentata*, tal es el caso de los grupos metilos -CH₃ (1452 cm⁻¹) y alcanos (2923 y 2858 cm⁻¹) presentes en todos los compuestos. También se observan los picos correspondientes a la tensión de los enlaces O-H (3390 cm⁻¹) del agua del hidrolato, que opaca los picos de los grupos alcohol; sin embargo, si logra observarse la flexión del mismo enlace (1376 cm⁻¹), característico en el linalool y terpineol. Son notorios también, el pico correspondiente al enlace C=O (1262 cm⁻¹) del alcanfor y acetato de linalilo, el correspondiente al enlace C-O del grupo éter (1166 cm⁻¹) presente en el 1, 8-cineol; y los de enlaces de alquenos trisustituidos (806 cm⁻¹) y disustituidos simétricos (886 cm⁻¹), los primeros correspondientes al linalol y acetato de linalilo; mientras que los segundos relacionados con compuestos como el limoneno, presente en menor proporción en *L. dentata*. En la figura 3, se muestra el espectro del hidrolato obtenido mediante hidrodestilación con infusión. Se aprecian picos tales como las pertenecientes a alcanos en (2962, 2926 y 2857 cm⁻¹), C-H de grupo metilo (1457 cm⁻¹), C=C de alquenos (1663 cm⁻¹), vibraciones de flexión de O-H de alcohol (1380 cm⁻¹) característicos del linalool y δ-terpineol; C-O de éter (1166 cm⁻¹) característico del 1, 8-cineol y O-C-C (1018 cm⁻¹) pertenecientes al éster, atribuible al acetato de linalilo.

Figura 3. Espectro infrarrojo del hidrolato de *L. dentata* obtenido mediante hidrodestilación con infusión

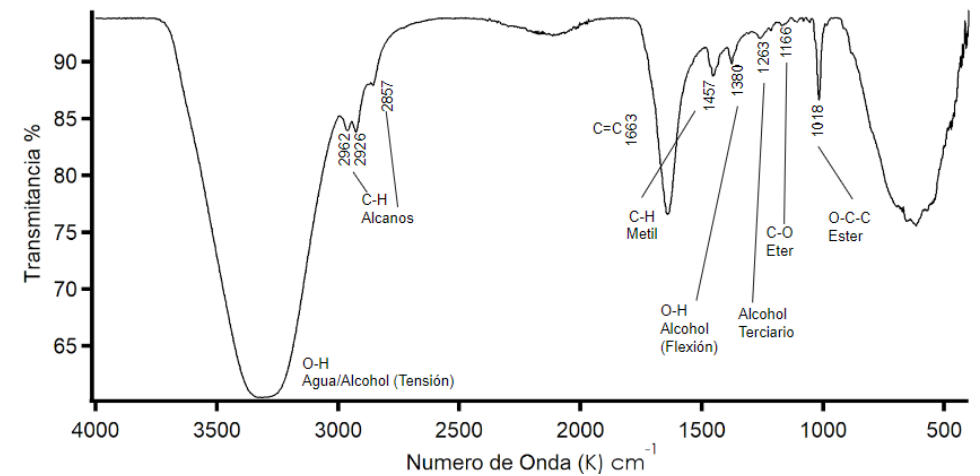
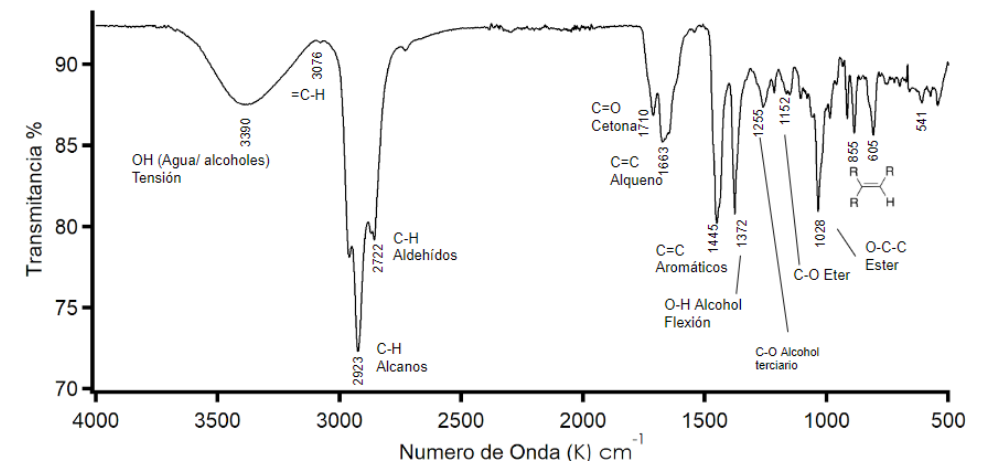


Figura 4. Espectro infrarrojo del hidrolato de *L. dentata* obtenido por hidrodestilación con solución saturada de NaCl



La figura 4 muestra el espectro correspondiente al hidrolato obtenido por hidrodestilación con solución saturada de NaCl; se identificó un pico característico de los alquenos trisustituidos (855 cm^{-1}), enlaces característicos de los terpenos, especialmente del acetato de linalilo y el linalool. Se observa también un pico característico de un enlace C=O (1710 cm^{-1}) perteneciente a cetonas, que se puede atribuir al alcanfor y a la fenchona; se identifica también un pico correspondiente a un enlace C-O (1255 cm^{-1}) presente en alcoholes terciarios, presentes en el linalool y terpineol. Los picos relacionados a la tensión del O-H de los alcoholes son opacados por los enlaces O-H (3390 cm^{-1}) del agua, pero por fortuna la flexión de estos enlaces en alcoholes si se puede apreciar (1372 cm^{-1}), por lo tanto son identificables. El pico característico de los grupos éter C-O (1152 cm^{-1}) puede ser atribuido al 1,8-cineol ya que este presenta este grupo funcional en una forma puentada. Además, se observa la presencia de diversos picos característicos de enlaces C-H con distintas hibridaciones del carbono, como alcanos o alquenos, estando presentes en todos los compuestos abundantes. C=C, en el caso del alqueno aromático (1445 cm^{-1}); estos se pueden atribuir al δ -terpineol. En la figura 5 se presenta el espectro del hidrolato obtenido mediante hidrodestilación asistida por ultrasonido; se aprecian las señales de los enlaces C-H de alcanos ($2955, 2844\text{ cm}^{-1}$), una que corresponde al grupo metilo (1452 cm^{-1}), un pico característico del enlace C-O y es perteneciente a un éter (1117 cm^{-1} y otro del enlace O-H (1407 cm^{-1}) perteneciente a un alcohol, atribuible al linalool y terpineol. Debido a esta información se propone la presencia de 1,8-cineol. Por último, se presenta un pico característico de un enlace O-C-C (1015 cm^{-1}) perteneciente a un éster, seguramente corresponde al acetato de linalilo.

Figura 5. Espectro infrarrojo del hidrolato de *L. dentata* obtenido por hidrodestilación asistida por ultrasonido

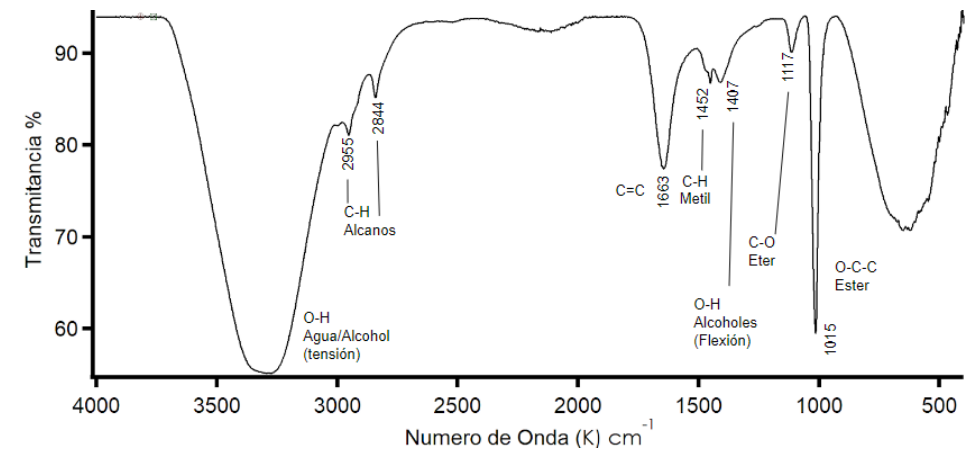
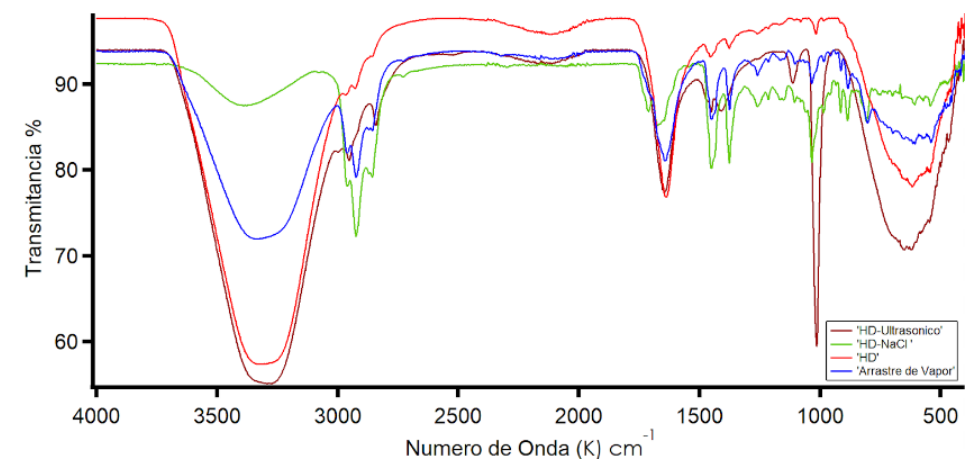
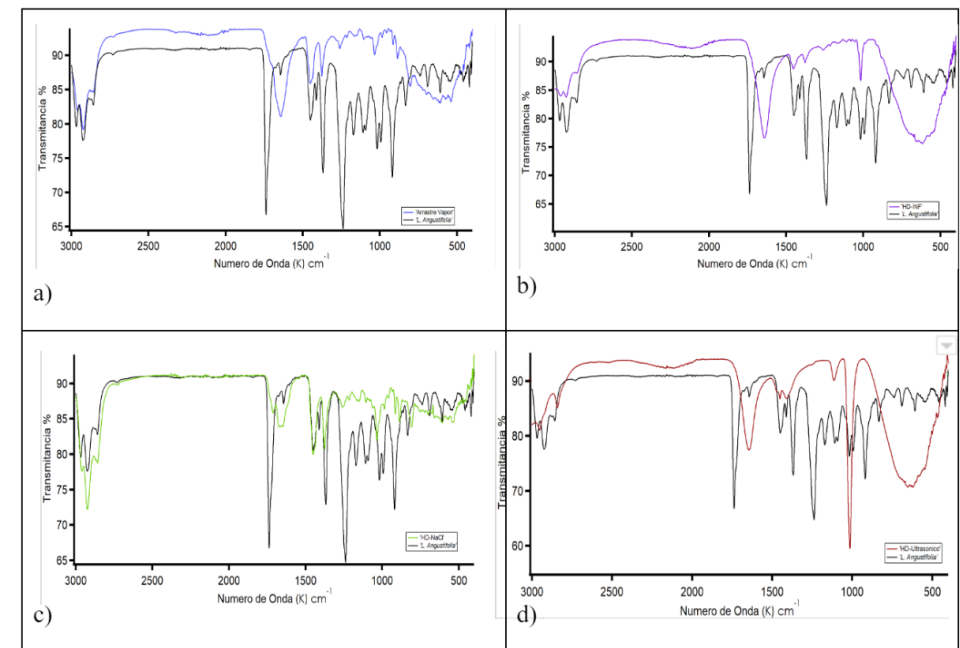


Figura 6. Comparación de los espectros IR de los hidrolatos de *L. dentata* obtenidos mediante las 4 técnicas realizadas. Azul: Arrastre de vapor; Rojo: Hidrodestilación con infusión; Verde: Hidrodestilación con solución saturada de NaCl; Marrón: hidrodestilación asistida por ultrasonido



Comparando los espectros IR, de los hidrolatos obtenidos mediante las cuatro técnicas realizadas (Figura 6), se observa que la técnica de arrastre de vapor (espectro azul), la más utilizada en la industria, permite la extracción de una importante cantidad de compuestos en el aceite esencial de *L. dentata* lo que se deduce por la cantidad y variedad de picos característicos de los compuestos volátiles; esto en comparación con los hidrolatos obtenidos con la hidrodestilación con infusión y la asistida con ultrasonido. En el espectro del hidrolato obtenido con hidrodestilación con infusión (espectro rojo) se aprecia una mayor cantidad de picos pero de menor tamaño en comparación con el obtenido con el pretratamiento de ultrasonido (espectro marrón) donde no aparecen los picos característicos de cetonas; lo cual sugiere la extracción de pocos compuestos pero en mayor cantidad. La técnica de hidrodestilación con solución de NaCl favoreció la extracción de una mayor variedad compuestos en el hidrolato y en mayor cantidad. De hecho se pudo extraer una gota casi libre de agua, lo cual no fue posible a partir de los hidrolatos obtenidos por las otras técnicas; esto se muestra en la Figura 6 (espectro verde), donde las señales características del agua ($3700-3000\text{ cm}^{-1}$) son mucho más pequeñas en comparación con los demás espectros; asimismo, en el espectro de este hidrolato fue en el que se identificó mayor número de señales correspondientes a los componentes de los aceites esenciales de *L. dentata*, y en mayor tamaño, respecto al obtenido con pretratamiento ultrasónico y sobrepasa el de los demás hidrolatos, e incluso el del aceite de referencia. No obstante, es importante recordar que la espectroscopía IR utilizada en la presente investigación no tuvo fines cuantitativos, sólo cualitativos y comparativos.

Figura 7. Comparación de los espectros IR de los hidrolatos de *L. dentata* obtenidos mediante las cuatro técnicas realizadas con el espectro del aceite esencial comercial de *L. angustifolia* (negro). a) Arrastre de vapor; b) Hidrodestilación con infusión; c) Hidrodestilación con solución saturada de NaCl; d) Hidrodestilación asistida por ultrasonido



Como se mencionó anteriormente, los aceites esenciales de las flores de las 60 especies de *Lavandula* comparten algunos componentes, pero no son iguales en su composición. Esto se observó en la comparación del espectro IR del aceite comercial de *L. angustifolia*, con el de los hidrolatos obtenidos en la presente investigación. En la figura 7 se comparan los espectros; cabe aclarar que para fines comparativos se omite en estos espectros el pico generado por el agua ($500-3000\text{ cm}^{-1}$) para poder ampliar las señales de interés. En estas comparaciones se encontró que, de acuerdo con la técnica de extracción aplicada, se comparte mayor o menor número de señales con el hidrolato de *L. dentata*. Por ejemplo, existe un mayor número de coincidencias con el hidrolato obtenido por arrastre de vapor ($1376, 1262, 1452, 1720$ y 1118 cm^{-1} ; y 1050 y 1166 cm^{-1} y la banda de absorción en 806 cm^{-1} y

menor con el hidrolato extraído mediante hidrodestilación asistida con ultrasonido (2955, 2844, 1452, 1407, 1117 cm^{-1}). Por otro lado, de forma general, el tamaño de las señales es comparativamente menor en los hidrolatos, lo que sugiere una menor concentración de los compuestos correspondientes debido a la presencia del agua en los hidrolatos en comparación con el aceite comercial puro. Una excepción fue el pico del éster (1015 cm^{-1}) que presenta un tamaño mucho mayor en el hidrolato obtenido con pretratamiento ultrasónico y que sobrepasa la señal en la misma posición en el aceite de referencia y en los demás hidrolatos.

CONCLUSIONES

Esta línea de investigación se enfoca en la búsqueda de maneras más rentables y eficientes de extraer aceites esenciales de diferentes plantas con efectos benéficos para el humano y con aplicaciones diversas, específicamente de *L. dentata*. Los resultados evidencian diferencias en la composición de los aceites esenciales de *L. angustifolia* y *L. dentata*. Sin embargo, el aceite esencial de *L. dentata* también contiene componentes de interés terapéutico y su uso podría ser promovido. Debido a la baja concentración de aceite esencial en las flores de *L. dentata* no fue posible su purificación ni la determinación del rendimiento, lo que nos condujo a optar por un enfoque cualitativo para constatar la presencia de los componentes principales en los hidrolatos obtenidos. Las variaciones en las técnicas propuestas indujeron al enriquecimiento de nuevos conocimientos y mejoras en las operaciones unitarias aplicadas en el laboratorio; además tuvimos la oportunidad de hacer uso de herramientas de análisis instrumental, una de las áreas más importantes en ingeniería bioquímica. Según los resultados de espectroscopia IR, se concluye que la técnica que mostró mayor eficiencia en la extracción de aceite esencial fue la hidrodestilación con NaCl, mostrando numerosas bandas correspondientes a los componentes de *L. dentata*, algunos de los cuales coinciden con los de *L. angustifolia*.

El hidrolato al ser un extracto acuoso, contiene una proporción muy pequeña de aceite esencial puro, y puede comercializarse como una opción diluida de aceite esencial para su uso en difusores aromáticos; asimismo, es posible su uso en productos cosméticos para aprovechar sus distintas propiedades.

Respecto a la experiencia obtenida durante el desarrollo de este proyecto en estancia de verano, nos permitió hacer uso de nuevas herramientas de trabajo y proponer opciones diferentes para la extracción de aceites esenciales empleando conocimientos de operaciones básicas de laboratorio y también se observó cómo agregando variantes a un método cambian notoriamente los resultados. Se propone continuar con esta investigación realizando cambios en las variables de temperatura y concentración de sal; así como en la relación volumen de agua:cantidad de flores con la finalidad de extraer cantidades separables y cuantificables de aceites esenciales. Otro aspecto que queda por analizar es el efecto de la cavitación en las flores y en las moléculas, especialmente sobre los grupos alcohol y éster ya que su presencia no fue detectada en la técnica donde se aplicó ultrasonido.

REFERENCIAS

- Dob, T., Dahmane, D., Tayeb, B., Chelghoum, C. (2005). Chemical composition of the essential oil of *Lavandula dentata* L. *International Journal of Aromatherapy*, 15(2), 110–114. <https://doi.org/10.1016/j.ijat.2005.03.010>
- El Abdali, Y., Agour, A., Allali, A., Bourhia, M., El Moussaoui, A., Eloutassi, N., Salamatullah, A. M., Alzahrani, A., Ouahmane, L., Aboul-Soud, M. A. M., Giesy, J. P., Bouia, A. (2022). *Lavandula dentata* L.: Phytochemical analysis, antioxidant, antifungal and insecticidal activities of its essential oil. *Plants*, 11(3), 311. <https://doi.org/10.3390/plants11030311>
- Filly, A., Fabiano-Tixier, A.S., Louis, C., Fernandez, X., Chemat, F. (2016). Water as a green solvent combined with different techniques for extraction of essential oil from lavender flowers. *Comptes Rendus Chimie*, 19(6), 707-717. <https://doi.org/10.1016/j.crci.2016.01.018>
- Martins, R.P., Gomes, R.A.S., Malpass, A.C.G., Okura, M.H. (2019). Chemical characterization of *Lavandula dentata* L. essential oils grown in Uberaba-MG. *Ciencia Rural*, 49(8), <https://doi.org/10.1590/0103-8478cr20180964>
- Molina, J.O.R., Castellano, A.M.T., Ochoa, Z.E.Z., Altamirano, L.E.Z., Rosero, O.F.P. (2022). Aceite Esencial de Lavanda (*Lavandula angustifolia*): Extracción, caracterización de compuestos volátiles, capacidad antioxidante y actividad antimicrobiana. *UTCiencia*, 9(3), 113–127
- National Center for Biotechnology Information. (2004). *PubChem* [Base de datos]. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- National Institute of Advanced Industrial Science and Technology. (1982). *Spectral Database for Organic Compounds (SDBS)* [Base de datos]. <https://sdfs.db.aist.go.jp/>
- Villaverde, I. C. (2018). *Optimización de la extracción de los aceites esenciales por destilación en corriente de vapor* [Tesis de pregrado, Universidad Politécnica de Madrid].

‘¡Don Beto! Ya tenemos nueva carretera’ La comunicación social y el Programa Nacional Solidaridad en México a fines del siglo XX

JUDITH GÓMEZ GONZÁLEZ
judith.gomez5807@alumnos.udg.mx

CECILIA CORDOVA ORTEGA
cecilia.cordova4376@alumnos.udg.mx

JOSÉ GUILLERMO CELIS ROMERO
jgcelis@academicos.udg.mx

RESUMEN

El Programa Nacional de Solidaridad (Pronasol) consistió en una propuesta de cofinanciamiento entre el gobierno, empresas y pobladores del país para desarrollar grandes proyectos durante el gobierno de Carlos Salinas de Gortari (1988-1994).

Para la difusión de los resultados de este programa, el gobierno hizo uso de herramientas de comunicación masiva —que comenzaban a ser cotidianos, como la televisión y la radio— para que el proyecto llegara a todas partes del país. El programa tenía una gran amplitud, pues trataba básicamente todas las áreas de necesidad social: economía local, educación, medio ambiente, seguridad, inclusión social, apoyo económico, movilidad, entre otros.

El éxito y alcance de este programa se debe, en gran medida, a la manipulación sentimental y nacionalista que difundían los medios de comunicación para obtener “confianza” y “cooperación” ciudadana, a pesar de que el gobierno no necesariamente era recíproco.

PALABRAS CLAVE

Comunicación (communication), PRONASOL, Emotivo (emotional), Política (politics), Desarrollo social (social development).

INTRODUCCIÓN

El Programa Nacional de Solidaridad (PRONASOL) fue creado durante la presidencia de Carlos Salinas de Gortari (1988-1994) como una especie de estrategia de gobernabilidad debido al historial fraudulento de las elecciones que llevaron a dicho partido al poder. En un principio este programa fue delegado a la Secretaría de Programación y Presupuesto, pero poco después se transfirió a la recién creada Secretaría de Desarrollo Social (SEDESOL), en 1992 (Martínez y Benavides, 2018).

El Pronasol estaba dirigido a toda la población urbana, pero especialmente a aquellos que vivían en pobreza extrema. Este programa se definió como “el instrumento creado por el Gobierno de la República para emprender una lucha frontal contra la pobreza extrema mediante la suma de esfuerzos coordinados en los tres niveles de Gobierno y los concertados con los grupos sociales” (Consejo Consultivo del Programa Nacional de Solidaridad, 1994, 8).

Los medios tecnológicos, especialmente la televisión, jugaron un papel crucial en la dinámica de poder y dominación en México, pues a través de ellos se transmitió todo un ideario —claramente, el de la clase dominante—, dado que el estilo autoritarista caracterizaba el régimen salinista.

El denominador común de todos los anuncios y propaganda del Pronasol era que estaban llenos de sentimentalismo y nacionalismo, elementos que influían en el actuar de los pobladores. Esta exposición emotiva y de cooperación orilló a las personas a aportar recursos materiales, físicos (trabajo) o ambos para solventar sus necesidades; a pesar de que ese no era precisamente su deber.

Curiosamente, a la par de que se empleaban estos métodos de difusión masiva, el neoliberalismo —impuesto— entraba de lleno al país; por lo que se convierte en un factor de gran importancia en las técnicas y alcance de la política, pues según Salinas, México tenía el tamaño suficiente como para regular el mercado y promover su desarrollo.

Salinas utilizó, como nunca antes algún gobierno lo habrá hecho, los medios de comunicación masiva como herramienta de promoción de su proyecto económico y social y, hasta cierto punto, su imagen personal, con el objetivo de asegurar su posición política y la de su partido en el futuro.

Este proyecto hace un análisis de la historia mexicana contemporánea y el uso que se les dio a los medios de comunicación masiva para difundir

los mensajes y acciones que llevaba a cabo el gobierno. Para dicho análisis, se partirá de una base teórica; por un lado se encuentra John B. Thompson con su teoría de la comunicación mediática y su contextualización social, y por el otro Guillermo Orozco Gómez con las dinámicas de audiencia y emisor-receptor. Considerando los aportes e ideas de estos autores, se contrastará con algunos anuncios y propaganda de este programa con el fin de ejemplificar la compleja influencia de los medios de comunicación en la vida social y política del país.

MATERIALES Y MÉTODOS

Durante la estancia de investigación se realizó el análisis de la campaña mediática que el entonces presidente de México, Carlos Salinas de Gortari (1988) lanzó para la divulgación de la propuesta y los resultados del Programa Nacional de Solidaridad (PRONASOL); dicha campaña fue transmitida en los medios de comunicación masiva que preponderaron durante la época, es decir, televisión y radio; se realizaron una serie de comerciales con actores y una canción con un videoclip donde participaron artistas mexicanos que tenían gran popularidad. Esta campaña consistió en la transmisión y divulgación de los comerciales que informaban a la ciudadanía sobre los resultados que el programa PRONASOL estaba dando y cómo podía participar de manera activa todo aquel que lo deseara o le fuera necesario. Dichos comerciales, al igual que la popular canción “Solidaridad” estaban repletos de simbolismos que exaltaban al trabajo colaborativo, el nacionalismo, el patriotismo, la lucha del campesino, en fin, “la solidaridad” entre todo el pueblo mexicano, el gobierno y las empresas privadas.

Para el análisis que realizamos de la mencionada campaña, nos hemos basado en dos teorías sobre los medios de comunicación que nos hablan sobre: los contextos sociales, las audiencias, la comunicación social o la mediatización. La primera es un texto de John B. Thompson, *Los media y la modernidad: una teoría de los medios de comunicación*, en este texto el autor analiza algunas características de la comunicación mediática, de la misma manera, analiza las formas simbólicas que se expresan en los *media* y la contextualización social. La segunda base teórica es del autor Guillermo Orozco Gomez, *Televidencias: comunicación, educación y ciudadanía*, en dicho libro se describe y explica el significado de “ser audiencia”, sus formas y las

transformaciones que tienen las audiencias e impacto en la recepción del mensaje a través de las pantallas de acuerdo al contexto social.

En el primer texto, el autor habla sobre la producción y reproducción de “las formas simbólicas”, es decir, las emociones como productos de consumo, que se pueden comprar o vender. En ese sentido, la comunicación mediática comienza a tomar un papel fundamental en la vida de las personas, pero dicho papel tendrá un impacto distinto dependiendo de las condiciones estructurales tanto del emisor como del receptor.

Thompson retoma algunas ideas del sociólogo francés Pierre Bourdieu para hablar de los “campos de interacción” y cómo dentro de esos campos se establecen ciertas figuras de poder que jerarquizan la relación entre las personas que forman parte de ese campo. En el caso de los *media*, el poder con el que cuentan puede ser muy amplio, sobre todo tomando en cuenta que era el Estado a quien le pertenecía toda forma de poder en la producción y reproducción de la campaña mediática del PRONASOL. Siguiendo la explicación del autor, el gobierno de Salinas contaba con la cantidad suficiente de recursos económicos para invertir en la compra de materiales e instrumentos necesarios para la realización de la campaña, desde la contratación de todos los actores y cantantes involucrados, así como lo que se requiere para la divulgación de los comerciales, esto es “poder económico”. Al tener al Estado como protagonista del proceso de la campaña del programa PRONASOL, tuvo todo el acceso libre a la televisión, la radio, para enviar el mensaje que quiso el entonces presidente Salinas de Gortari, ejerciendo su “poder político”. Por otro lado está el “poder coercitivo”, en el caso del Estado es claro por el uso del “poder militar” mediante la fuerza física para someter a las personas; Y finalmente, “poder simbólico”, que por supuesto se refleja en la reproducción, transmisión y recepción de formas simbólicas, queda más que claro el uso del poder simbólico para la manipulación social, a través de los *media*.

Uno de los comerciales que analizamos, y de los más populares de la campaña, fue sobre la construcción de una carretera:

Jacinto: ¡Don Beto! ¡Don Beto! ¡Don Beto! ¡Don Beto!

Don Beto: ¿Qué pasó?

Jacinto: Ya no vamos a usar burros pa' cargar la mercancía, ya podemos sacar los enfermos, ¡Ya tenemos carretera!

Don Beto: ¿Y ora' qué mosca te picó?

Jacinto: La carretera que hemos esperado tantos años

Don Beto: No me cotorreés Jacinto

Jacinto: ¡Le estoy hablando en serio!, ¿se acuerda del comité de Solidaridad que hicimos?

Don Beto: Sí

Jacinto: Pues ya está todo listo y mañana es el gran día, todo el trabajo que hicimos para construirla mañana lo veremos como una realidad

Don Beto: ¡Mañana se inaugura nuestra carretera!

Jacinto: Ora, pero ¿por qué está llorando don Beto?

Don Beto: si no estoy llorando Jacinto, lo que pasa es que me entró una basurita en los ojos y parece que estoy llorando pero pues no es cierto, pero tu si estas llorando Jacinto.

Jacinto: No Don Beto, lo que pasa es que a mi también me entraron basuritas en los ojos...

Voz de narrador: Solidaridad, unidos para progresar.

El mensaje es contundente: el comité de solidaridad funciona y la prueba de ello es que se va a inaugurar la primer carretera de “un pueblito”, la escena muestra una clásica “tiendita de la esquina” atendida por un adulto mayor, un joven muy entusiasmado por la noticia, un fondo musical esperanzador, las personas cruzando las calles de tierra, los perros y burros en la calle. Al final se ve a los personajes llorando.

Se puede decir que es un buen retrato de la cotidianidad de muchos pueblos mexicanos. Thompson explica cómo a partir del uso de los medios de comunicación se desarrollan ciertas competencias, habilidades y formas de conocimiento, almacenamiento, reproducción, grados de separación espacio-temporal (materiales pregrabados y separados del tiempo y el espacio en el que se producen). El autor retoma el concepto “comunicación de masas”, pero profundizando en las condiciones estructurales de las distintas sociedades, utilizando el término *masas* para referirse a la disponibilidad de consumo de un producto. En la época, los principales medios de comunicación eran la televisión y la radio, y tras la privatización de los propios medios de comunicación, los canales abiertos de televisión y radio durante el sexenio de Salinas fueron reducidos, además que gracias a los convenios entre las empresas mediáticas y el Estado, la transmisión de estos mensajes podía llegar casi a cualquier rincón del país.

Thompson continúa explicando que los receptores de los mensajes no son receptores pasivos, pero aclara que, en efecto, el flujo de comunicación puede ser abrumador debido a que lleva una sola dirección; de ahí la importancia que los receptores dan a las formas simbólicas que envuelven el mensaje. Regresando al ejemplo del comercial de Don Beto, las formas simbólicas no sólo es el llanto, es toda esa fotografía de la vida cotidiana, lo que envuelve el mensaje de la carretera y el comité, las emociones que puede producir escuchar o ver algo que nos es tan familiar, la frecuencia con que lo consumimos dependerá de todos estos elementos, ya que el productor no explica lo que quiso decir con cada símbolo que aparece en el comercial, sino que los receptores hacen sus propias interpretaciones, pero no sólo para sí mismos, lo comparten con el resto de las personas que pueden —o no— haber visto el mismo comercial. Es por eso que Thompson no considera de ninguna manera a las audiencias receptoras de los medios de comunicación masivos como audiencias pasivas, más bien todo lo contrario.

Guillermo Orozco Gomez, en su texto sobre las “televidencias”, plantea distintas teorías sobre la recepción de los mensajes para las audiencias mediados por pantallas. Partiendo del hecho de que la relación entre los medios y las audiencias comienza con el emisor y ya hemos explicado la concentración de poder en los distintos ámbitos que llegaron a tener *los media* durante el sexenio de Salinas (1988-1994).

Es precisamente a partir del siglo XX, que los grandes medios comienzan a revolucionar la comunicación para las audiencias “pasivas”, la comunicación unilateral se va perfeccionando desde las emisiones hasta la llegada del producto a las casas, no solo en cuestiones de calidad sino también en el “empaquetamiento cada vez más funcional para el emisor del mensaje mismo” (Orozco, 2012, 71).

El enfoque ideológico de la campaña era político, pero si recordamos el ejemplo de “¡Don Beto!” y pensamos en cada componente que envuelve el mensaje, es decir, esa fotografía de la cotidianidad, nos enfocamos entonces principalmente en las sensaciones, las emociones; podemos percibir entonces la comunicación mediática como un flujo de experiencias pero no de entendimientos o significados. Esos son los efectos de la mediatización, los medios de comunicación han alcanzado tal poder que se logran consolidar como instituciones independientes, capaces de producir, influir y difundir, productos para aumentar el consumo en las sociedades, bien lo decía Orozco: “las pantallas son un campo privilegiado para la publicidad” (2012, 84).

El proyecto de la difusión y divulgación de la campaña PRONASOL, fue tan importante que se puede decir que marcó un antes y un después, por lo menos en México, sobre el uso de los medios de comunicación para efectos políticos y del Estado.

RESULTADOS

Teniendo en cuenta que este fue el primer y general acercamiento a la problemática, consideramos que los avances que obtuvimos han sido bastante provechosos. Logramos comprender teorías sobre la comunicación de masas y cómo estas herramientas son utilizadas como medio de dominación social y político.

Realizamos la búsqueda y recopilación de distintas fuentes para ir formando el marco teórico de la investigación naciente, además de la transcripción de los comerciales utilizados por el Gobierno de México, para utilizarlos como parte de la recolección de fuentes primarias.

Analizamos un total de diez comerciales más la canción que fue creada como himno del programa. Estos comerciales los encontramos en la plataforma de vídeo YouTube, en los canales *carlosmezamar* y *ric rdz alva*. La duración promedio de estos comerciales es de un minuto o un minuto y

medio, pero a pesar de ser tan breves, es claro el mensaje que quieren dar. Para examinar mejor su estructura, símbolos y mensaje; utilizamos un formato de tabla en el cual, del lado izquierdo transcribimos los diálogos y del lado derecho las observaciones. Aquí el ejemplo del comercial de Don Beto:

Diálogos	Anotaciones
<p>Jacinto: ¡Don Beto! ¡Don Beto! ¡Don Beto! ¡Don Beto!</p> <p>Don Beto: ¿Qué pasó?</p> <p>Jacinto: Ya no vamos a usar burros pa' cargar la mercancía, ya podemos sacar los enfermos, ¡Ya tenemos carretera!</p> <p>Don Beto: ¿Y ora' qué mosca te picó?</p> <p>Jacinto: La carretera que hemos esperado tantos años</p> <p>Don Beto: No me cotorres Jacinto</p> <p>Jacinto: ¡Le estoy hablando en serio!, ¿se acuerda del comité de Solidaridad que hicimos?</p> <p>Don Beto: Sí</p> <p>Jacinto: Pues ya está todo listo y mañana es el gran día, todo el trabajo que hicimos para construirla mañana lo veremos como una realidad</p> <p>Don Beto: ¡Mañana se inaugura nuestra carretera!</p> <p>Jacinto: Ora, pero ¿por qué está llorando don Beto?</p> <p>Don Beto: si no estoy llorando Jacinto, lo que pasa es que me entró una basurita en los ojos y parece que estoy llorando pero pues no es cierto, pero tu si estas llorando Jacinto.</p> <p>Jacinto: No Don Beto, lo que pasa es que a mi también me entraron basuritas en los ojos...</p> <p>Voz de narrador: Solidaridad, unidos para progresar.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Música sutil, pero igual está presente. • Desde el inicio muestra el entusiasmo, primero del joven y después de Don Beto. • Inicia hablando de las facilidades que se les han concedido para después decir que es gracias a la carretera. • Muestra un momento conmovedor, incluso lágrimas de emoción ante el beneficio tan grande y tan esperado. • El contexto del señor de "la tiendita de la esquina" un adulto mayor, que lleva años esperando que eso suceda. • No dan tantos detalles sobre cómo funciona el programa, pero menciona al "comité de Solidaridad" y el esfuerzo que hicieron de manera colaborativa. • Dato curioso del comercial es que se habla de la carretera nueva, de sacar a los enfermos y que ya no van a ser necesarios los burros, pero lo único se logra apreciar en el comercial además de las personas, son burros, ningún carro.

Nos dimos cuenta que la manera más eficaz para movilizar masas ha sido mediante el ámbito emotivo, es por ello que los anuncios y promocionales del PRONASOL estaban llenos de mensajes como “*unidos para progresar*”, “*trabajando juntos para el futuro*” o “*los mexicanos emprendemos hacia el progreso*”. A través de la explosión de sensaciones, emociones y afectividades, la publicidad del programa Solidaridad marcó a generaciones de espectadores y generó un crisol de posibilidades de interpretación entre las comunidades mexicanas que podría ser una vía a explorar en un proyecto posterior.

Concebimos que el Programa Nacional de Solidaridad más que lograr su cometido de “acabar con la pobreza” o “generar una unidad social para lograr un desarrollo comunitario”, era una estrategia gubernamental elaborada por Salinas de Gortari y su gabinete para mantener su posición política por un largo tiempo. La emisión de mensajes a través de medios de comunicación sentó un precedente en las formas en que los gobiernos federales posteriores comunicaron sus supuestos resultados a la población en el país.

Respecto a la ola neoliberal en México, superficialmente entendimos que al ser impuesta en el país y en las políticas públicas, realmente no fue de mucha ayuda; sino que más bien su propósito era la de fungir como una idea —falsa— de desarrollo social, mientras las figuras de poder obtenían beneficios a costa de la vulnerabilidad del pueblo mexicano.

CONCLUSIONES

Tanto el análisis que se realizó, como la recopilación de fuentes, están pensadas en el principio de una investigación que requiere mayor indagación de documentos y fuentes hemerográficas. Sin embargo, podemos destacar algunos puntos importantes como: comprender gracias a estas dos teorías sobre la comunicación social y los medios que todo lo transmitido por los medios audiovisuales tiene un significado, que la manipulación social a través de *los media* requiere de muchos más elementos que el mensaje puro, que el contexto social de México durante el gobierno de Carlos Salinas —junto con las políticas de privatización empleadas por este mismo— facilitaron la polarización del país con una campaña mediática que dominaba todos los canales de televisión y radio, la concentración de poder político, económico, coercitivo y simbólico del Gobierno del Estado facilitó el desplazamiento de la campaña mediática del PRONASOL.

A pesar de ser una investigación prácticamente virgen, esperamos primeramente poder seguir adentrándonos en el tema para poder exponerlo con más profundidad y precisión y no tanto de manera monográfica, como lo fue en esta ocasión. Además, esperamos que lo aquí abordado sirva como referencia o punto de partida para más personas interesadas en políticas o comunicación masiva, ya sea el caso de estudiantes de humanidades o no.

REFERENCIAS

- Barba Solano, C. (2007). Claroscuros de la reforma social en México y América Latina. *Espiral*, 13 (39) 35-76.
- Barba Solano, C., Valencia Lomelí, E. (2013). La transición del régimen de bienestar mexicano, entre el dualismo y las reformas liberales. *Revista Uruguaya de Ciencia Política*, (22).
- Camargo, J. (1996). *El sector agropecuario frente a los nuevos retos del TLC*. [Archivo PDF]. <https://www.probedes.iiec.unam.mx/index.php/pde/article/view/29203/27150>
- Canal carlosmezamar.(10 de marzo de 2013). *Comercial Solidaridad "Pasante de Ingeniero"* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=eU7JJE03np8>
- Canal carlosmezamar. (17 de abril de 2011). *Comercial Solidaridad (Beca Escuela) 9os México* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=TsN84rF-jlU>
- Canal carlosmezamar. (28 de abril de 2023). *Comercial Solidaridad México Alumbrado Público* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=O7hx-KOM4-U>
- Canal carlosmezamar. (6 de noviembre de 2009). *Solidaridad - Videoclip Original* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=hCbnnewabpE>
- Canal ric rdz alva. (14 de julio de 2021). *Comerciales mexicanos: Solidaridad 1992* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=WfqJjipiV9Y>
- Canal ric rdz alva. (14 de julio de 2021). *Comerciales mexicanos: Solidaridad 1992* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=WfqJjipiV9Y>
- Canal ric rdz alva.. (3 de septiembre de 2022). *Comerciales mexicanos: Solidaridad 1991 2* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=dgZPpezui6o>
- Canal ric rdz alva. (28 de diciembre de 2018). *Comerciales mexicanos: Solidaridad 1993* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=FRNGteA634o>
- Canal Sergio S. (5 de octubre de 2012). *Comerciales mexicanos- Gobierno Solidaridad 1992* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=mq4MF6vB788>
- Canal ZONA RETRO. (9 de febrero de 2015). *Don Beto ya tenemos carretera Spot de Tv Solidaridad 1992* [Archivo de Vídeo]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=8i3ZaaUBNbk>
- Ciro, L. (1991). *Solidaridad gratuita en todas las pantallas*. [Archivo PDF]. https://archivo.estepais.com/inicio/historicos/7/3_reportaje_solidaridadgratuita_leyva.pdf
- Colaboradores de Wikipedia. (19 de octubre de 2023). *Carlos Salinas de Gortari*. Wikipedia, la enciclopedia libre. https://es.wikipedia.org/wiki/Carlos_Salinas_de_Gortari
- Cordera Campo, R y Lomelí Vanegas, L. (2033). *El Programa Nacional de Solidaridad (PRONASOL) y la política social en México en La pobreza rural en América Latina: lecciones para una reorientación de las políticas, 198-209*. Publicación de las Naciones Unidas.
- El financiero. (25 de abril de 2013). *Salinas, PRONASOL, PRI, Sucesión 1994*. <https://www.elfinanciero.com.mx/opinion/carlos-ramirez/salinas-pronasol-pri-sucesion-1994/>
- Fijałkowska, A. (2013). ¿La fórmula mexicana siempre viva?: televisión y poder en México. Itinerarios. *Revista de estudios lingüísticos, literarios, históricos y antropológicos*, (18) 181-196.
- Gordon, S. (1993). La política social y el Programa Nacional de Solidaridad. *Revista Mexicana de Sociología*, 55 (2), 351-366
- Guiomar Rovira, S. (2017). Activismo mediático y criminalización de la protesta: medios y movimientos sociales en México. *Convergencia* 20 (61)
- Martínez Garza, F. J. (2011). El desafío de la televisión mexicana. *Contratexto*, (19) 53-72.
- Medina, L. (2006). *Los años de Salinas: crisis electoral y reformas*. [Archivo PDF]. https://cide.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1011/181/1/000070571_documento.pdf
- Novelo, H. R. (2017). *La representación televisiva del sexenio de Carlos Salinas de Gortari a través del noticiero "24 Horas" (1988-1994)*. [Tesis de Doctorado, Colegio de Michoacán] <https://colmich.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1016/163>
- Ordoñez, G. (2017). El Estado social en México. Un siglo de reformas hacia un sistema de bienestar excluyente. *Foro Internacional* 58 (4) 210.
- Orozco, G. (2012). *Televidencias. Comunicación, educación, ciudadanía*. Universidad del Rosario
- Sánchez Albarrán, A. (2009). Política social. *El Cotidiano*, (156) 253-266.
- Sandoval Forero, E. A.(2002). Televisión y política mediática en México. *Convergencia* 9 (30) 257-273.
- Thompson, J. B. (1998). *Los media y la modernidad: una teoría de los medios de comunicación*. Paidós.
- Zarur, Osorio A. E. (1995). *El estado y modelo de televisión adoptado en México: el salinismo*. [Archivo PDF]. <https://gestionestrategia.azc.uam.mx/index.php/rge/article/view/446/1125>

Gamificando la lengua de señas en un proceso de inclusión

SERGIO MIKHAIL FRANCO RAMÍREZ
sergio.framirez@alumnos.udg.mx;

AURIA LUCÍA JIMÉNEZ GUTIÉRREZ
auria.jimenez@academicos.udg.mx

LUIS JAVIER LÓPEZ REYES
javier.lopez@academicos.udg.mx

DIANA COSTILLA LÓPEZ
diana.costilla@academicos.udg.mx

RESUMEN

El presente trabajo consistió primero en conocer la situación actual en México sobre la discapacidad auditiva, la cual del 16.5 % de la población mexicana que tiene algún tipo de discapacidad, el 24.4 % tienen algún tipo de discapacidad auditiva y otro 10.7 % tienen algún tipo de discapacidad para hablar o comunicarse de tal forma que en total un 35.1 % de la población que tiene alguna discapacidad tiene la necesidad de utilizar la lengua de señas. Estas cifras se consideran inferiores a las reales debido a que suele ser un estigma el tener este tipo de discapacidades (Censo, 2020).

A partir de estos números y conociendo el impacto que han tenido las redes sociales, se eligió Tiktok, ya que permite crear videos cortos con el fin de llevar a cabo la inclusión de la Lengua de Señas Mexicano (LSM) a la sociedad, aplicando la gamificación para hacer los videos interactivos.

PALABRAS CLAVE

Gamificación (gamification), Lengua de señas (sign language), Inclusión (inclusion), Redes sociales (social media), Tiktok.

INTRODUCCIÓN

La comunidad sorda en México utiliza la Lengua de Señas Mexicana (LSM), la cual es una lengua visual-gestual que se basa en los movimientos de las manos, las expresiones faciales y el lenguaje corporal para transmitir significados. La LSM tiene su propia gramática y estructura lingüística. No es simplemente una representación visual del español u otro idioma oral, sino que tiene sus propias reglas gramaticales, sintaxis y morfología. El espacio y la dirección son elementos fundamentales en la LSM. Los diferentes lugares en el espacio se utilizan para representar distintos conceptos, y la dirección de los movimientos de las manos y los gestos puede cambiar el significado de una señal. Las expresiones faciales y corporales pueden modificar o complementar el significado de las señas. La expresión facial y la postura corporal pueden indicar emociones, enfatizar puntos importantes o cambiar el tono de la conversación. Al igual que los idiomas hablados, la LSM puede variar en su léxico y algunas características gramaticales según la región geográfica. Se pueden encontrar variaciones regionales en las señas y en la forma en que se utiliza el espacio y la dirección. La LSM es una lengua viva y dinámica que ha evolucionado con el tiempo y sigue adaptándose a las necesidades y contextos de la comunidad sorda que reflejan la diversidad de la comunidad sorda de México. A medida que cambian las necesidades y la tecnología, también puede incorporar nuevos términos y adaptarse a nuevas formas de comunicación. Se podrá destacar las siguientes características lingüísticas según la Subsecretaría de Educación Básica y la Coordinación Estatal de Educación Especial (SE/ISEP)

- Constituye el patrimonio histórico de una comunidad sorda.
- Es la primera lengua para las personas sordas de una comunidad.
- Es una lengua que no usa la voz.
- No es universal, cada comunidad sorda tiene su lengua de señas.
- Es una necesidad para comunicarse con las personas sordas.
- La LS puede expresar cualquier concepto y los fenómenos del mundo que lo rodea.
- Es una lengua flexible y se actualiza generacionalmente, con habilidad de indicar múltiples personas, números, tiempo, afirmaciones, negaciones, preguntas, al igual que la lengua oral o escrita.

- Al igual que la lengua oral, la LSM respeta los modismos que cada individuo usa e imprime su personalidad, así como cada comunidad su regionalismo en el uso de la lengua (pp.28-29).

Se han realizado esfuerzos para promover el reconocimiento y la accesibilidad de la LSM en México. En 2003, el gobierno mexicano reconoció oficialmente la LSM como idioma nacional para la comunidad sorda, enfatizando su importancia y los derechos de las personas sordas a usar su lengua de señas nativa. En general, la Lengua de Señas Mexicana es una lengua rica y expresiva que sirve como medio de comunicación y expresión cultural para la comunidad sorda en México. Desempeña un papel vital en el fomento de la inclusión y la igualdad de oportunidades para que las personas sordas participen plenamente en la sociedad (Escobedo, 2017).

Tratando de dar una alternativa que permita a la sociedad acercarse a la LSM, se hizo uso de una propuesta con enfoque de gamificación o ludificación, que a partir del juego se pueda ir avanzando en el aprendizaje de alguna técnica o materia, en este caso de la LSM, con el fin de normalizar el uso y comenzar un proceso de inclusión.

MATERIALES Y MÉTODOS

El método de investigación que se ocupó fue mixto, tanto cuantitativo como cualitativo. Su propósito es describir variables y analizar su incidencia e interrelación en un momento dado. Comenzamos con una investigación de los antecedentes y la situación actual del uso de la gamificación en la enseñanza del LSM, y a partir de ahí se realizó un análisis del impacto de las redes sociales en la sociedad para elegir una de ellas y crear el contenido acorde a la red social seleccionada.

La inclusión de la lengua de señas mexicana es esencial para garantizar la participación plena y equitativa de las personas sordas en la sociedad. Según el sitio web del gobierno mexicano: “En México, aproximadamente 2.3 millones de personas padecen discapacidad auditiva, de las cuales más del 50 por ciento son mayores de 60 años; poco más de 34 por ciento tienen entre 30 y 59 años y cerca de 2 por ciento son niñas y niños” (Secretaría de Salud, 2021).

Algunos aspectos importantes sobre la inclusión del LSM son los siguientes:

ACCESO A LA INFORMACIÓN

Es fundamental que las personas sordas tengan acceso a la información en igualdad de condiciones. Esto implica proporcionar servicios de interpretación en diferentes ámbitos, como la educación, los servicios médicos, los medios de comunicación y los eventos públicos. Además, es importante fomentar la producción de materiales en LSM, como libros, videos y recursos educativos, para que las personas sordas puedan acceder a la información en su propio idioma.

EDUCACIÓN INCLUSIVA

La inclusión del LSM en el sistema educativo es clave para garantizar que los estudiantes sordos tengan acceso a una educación de calidad. Esto implica contar con maestros capacitados, intérpretes y recursos educativos adaptados a las necesidades. Además, promover la enseñanza del LSM a estudiantes oyentes puede fomentar la comunicación y la comprensión entre personas sordas y oyentes.

EMPLEO Y OPORTUNIDADES LABORALES

Es importante promover la inclusión laboral de las personas sordas, brindando igualdad de oportunidades y eliminando barreras de comunicación en el lugar de trabajo. Proporcionar servicios de interpretación en entrevistas de trabajo y reuniones laborales, así como fomentar la sensibilización y la capacitación en LSM para los empleadores, puede facilitar la inclusión y el éxito profesional de las personas sordas.

SENSIBILIZACIÓN Y RESPETO

Fomentar la sensibilización y el respeto hacia el LSM y la comunidad sorda es fundamental para una inclusión efectiva. Esto implica promover la valoración del LSM como una lengua legítima y respetar las normas y la cultura de la comunidad sorda.

El desinterés por el LSM puede ser el resultado de la falta de conciencia y comprensión sobre las necesidades y los derechos de las personas sordas, por eso es importante educar a la sociedad sobre su importancia y promover su uso en diferentes ámbitos, como la educación, los servicios públicos y la comunicación cotidiana. Asimismo, la falta de interés también puede ser un reflejo de los estereotipos y prejuicios hacia las personas sordas.

Promover la valoración y el respeto hacia la LSM implica crear conciencia sobre los beneficios de su uso, la inclusión, la igualdad de oportunidades y la participación plena de las personas sordas en la sociedad. Además, se deben proporcionar recursos y apoyo adecuados para que las personas sordas puedan aprender y utilizar el LSM de manera efectiva.

Por otro lado, la gamificación es una técnica de aprendizaje que traslada la mecánica de los juegos al ámbito educativo-profesional con el fin de conseguir mejores resultados, ya sea para absorber mejor algunos conocimientos, mejorar alguna habilidad, o bien recompensar acciones concretas, entre otros muchos objetivos (Gaitán, 2013).

La idea principal de la gamificación es aplicar elementos y principios de diseño de juegos en contextos no relacionados con los juegos para aumentar la participación, la motivación y el compromiso de las personas en diversas actividades. En esencia, se trata de utilizar la psicología y la dinámica de los juegos para mejorar la experiencia y los resultados en áreas como la educación, el trabajo, la salud, el marketing y otros campos.

La inclusión de la Lengua de Señas Mexicano ha sido un proceso gradual y evolutivo que ha avanzado a lo largo del tiempo en México. Estos son algunos antecedentes históricos de la inclusión del LSM en la sociedad mexicana.

DÉCADAS ANTERIORES

Antes de la popularización de la tecnología y la mayor conciencia sobre la accesibilidad, las personas sordas en México enfrentan barreras significativas en la comunicación y la educación. La falta de reconocimiento del LSM como una lengua legítima limita sus oportunidades.

RECONOCIMIENTO DEL LSM

En 2011, se promulgó la Ley General para la Inclusión de las Personas con Discapacidad en México, que reconocía el derecho de las personas con discapacidad a utilizar la lengua de señas mexicana y otras formas de comunicación. Esto marcó un paso importante hacia su aceptación y valoración.

EDUCACIÓN INCLUSIVA

En la última década, ha habido un enfoque creciente en la educación inclusiva para las personas sordas. Se han implementado programas educativos que

integran la LSM en las aulas, permitiendo una enseñanza más efectiva y una experiencia educativa en igualdad de condiciones. En el 2020 el Gobierno de Nuevo León a través del Instituto Estatal de la Juventud, ha puesto a disposición del público en general una serie de videos en *Youtube*, con tutoriales que permiten a cualquier persona aprender lo básico de la LSM. Por otra parte, la Universidad de Guadalajara inició en 2021 un programa de capacitación para el uso de la LSM en el ámbito educativo, en el que participan docentes de nivel bachillerato y educación superior (UDG, 2021; INJUVE Nuevo León, 2020).

MEDIOS DE COMUNICACIÓN

A medida que las tecnologías de comunicación avanzaban, se hizo más evidente la necesidad de incluir la LSM en los medios. Algunos programas de televisión comenzaron a incluir intérpretes de la LSM para transmitir las noticias y otros contenidos, aumentando la accesibilidad para la comunidad sorda. El noticiero de Lolita Ayala comenzó a contar con interpretación en Lengua de Señas Mexicana (LSM) desde el terremoto de 1985 (Ayala, 2024). Este fue un paso importante para garantizar el acceso a la información para personas sordas o con discapacidad auditiva.

Internet y Redes Sociales: La llegada de Internet y las redes sociales brindó nuevas oportunidades para la inclusión del LSM. Las personas sordas comenzaron a utilizar plataformas en línea para compartir contenido en lengua de señas, promover la sensibilización y conectarse con otros miembros de la comunidad sorda.

FORMACIÓN DE INTÉRPRETES

La formación de intérpretes de LSM se volvió esencial para facilitar la comunicación entre personas sordas y oyentes en diversos contextos, como eventos públicos, reuniones, conferencias y servicios de salud. La profesionalización de los intérpretes ha contribuido a una comunicación más efectiva y fluida.

INCLUSIÓN EN LA LEY

En 2018, se reformó la Constitución de la Ciudad de México para incluir el derecho a la lengua de señas y la accesibilidad de las personas sordas. Esto marcó un hito en el reconocimiento institucional del LSM y su importancia para la inclusión social.

DESARROLLO DE RECURSOS EDUCATIVOS

Se han desarrollado recursos educativos en línea y aplicaciones móviles que enseñan la LSM y promueven su uso entre personas sordas y oyentes. Esto contribuye a la difusión y normalización de la lengua. Como ejemplo se han creado canales de *youtube* como es *LSM Enseñando*, *MENTE INCLUYENTE*, guías, diccionarios, entre otros.

La inclusión del LSM en el ámbito de la gamificación y la tecnología ha sido un desarrollo importante en la promoción de la accesibilidad y la participación equitativa de personas sordas o con discapacidad auditiva.

En la rama de lo educativo hemos visto la creación de plataformas de educación en línea, aplicaciones de aprendizaje y juegos educativos han comenzado a incluir contenido en Lengua de Señas Mexicano para permitir que las personas sordas puedan acceder al mismo contenido que las personas oyentes. Esto no solo brinda igualdad de oportunidades, sino que también fomenta la inclusión en entornos educativos.

Las funciones principales de las redes sociales son el facilitar la comunicación y el intercambio de información y favorecer la creación de comunidades. Es por ello que su uso creció de manera exponencial (Blasco, 2021).

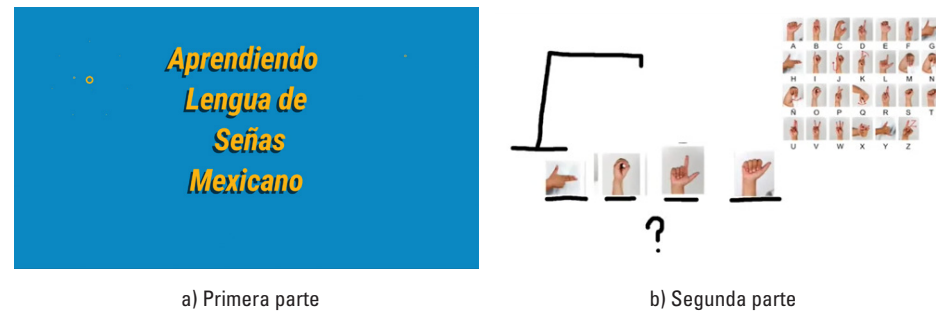
Las redes sociales se pueden clasificar como horizontales, verticales, verticales-mixtas, profesionales y de ocio. Considerando que se desea implementar la gamificación en un tema particular como es el LSM, se eligió la red social Tiktok por ser dirigida a cualquier público y que se centra en videos cortos.

RESULTADOS

A partir de la investigación realizada se creó un pequeño video, dividido en dos partes, que se publicó en la red social TikTok. Consiste en un juego conocido como el ahorcado, en donde el espectador con el deletreo aprende a saludar letra por letra o con su forma integral.

Los videos se encuentran publicados por la cuenta @chequiino7, a partir del 25 de julio de 2023. Los enlaces a las dos partes del *tiktok* están disponibles en las referencias del presente documento, en la Figura 1a. se muestra el inicio del video corto, y en la Figura 1b. se muestra una impresión de cómo se realiza el juego.

Figura 1. Tiktok ¡Jugando con lenguaje de señas mexicano!#LSM #paratii #new #lenguajecorporal



En el *Tiktok* publicado se les pide realizar una retroalimentación, para evaluar el trabajo realizado como un comentario, en la Tabla 1 se muestran algunos de los comentarios recibidos.

Tabla 1. Comentarios de retroalimentación del tiktok

No.	Comentario
1	Una gran idea para trabajar y aprender el lenguaje de señas! Gracias
2	Es muy importante la inclusión la lengua de señas en la vida diaria
3	Una forma súper creativa y divertida de aprender el lenguaje de señas! Más personas como tú! y el mundo cada día será mejor
4	Muy aesthetic de tu parte

Como se muestra en los comentarios, es una propuesta que le gusta al público, y que es necesario realizar mayor difusión y elaborar más *tiktok*, además de crear una cuenta no personal para llegar a más personas.

La creación de recursos educativos abiertos que implementan el uso de la gamificación o algunas otras técnicas innovadoras para el aprendizaje, se puede destacar el impacto que han tenido en diversos sentidos como lo son:

- *Accesibilidad y alcance amplio.* Estas plataformas digitales permiten un acceso fácil y amplio a la información. Cualquier persona con conexión a internet puede acceder a los recursos educativos en LSM en cualquier momento y lugar, lo que amplía considerablemente su alcance.

- *Diversidad de formatos.* Los recursos educativos en Youtube, Tiktok y guías ilustradas ofrecen una variedad de formatos, lo que se adapta a diferentes estilos de aprendizaje y necesidades de los usuarios.
- *Atracción de audiencias más jóvenes.* Plataformas como Tiktok son especialmente populares entre los jóvenes, lo que brinda la oportunidad de llegar a una audiencia más amplia y diversa, incluidos aquellos que podrían no estar expuestos de otra manera a la LSM.
- *Interactividad y participación.* Estas plataformas permiten la interacción directa entre los creadores de contenido y los espectadores a través de comentarios, mensajes directos y desafíos, lo que fomenta la participación activa y el aprendizaje colaborativo.
- *Desmitificación y sensibilización.* La presencia de recursos educativos sobre la LSM en plataformas populares contribuye a desmitificar la lengua de señas y promover una mayor sensibilización sobre las necesidades y experiencias de las personas sordas o con discapacidad auditiva en la sociedad.

CONCLUSIONES

La importancia de la lengua de señas mexicana (LSM) funge como una herramienta vital para la comunicación y la inclusión de las personas sordas en la sociedad mexicana. La promoción y difusión de la LSM son fundamentales para garantizar el acceso equitativo a la información, los servicios y las oportunidades para las personas sordas y con dificultades auditivas.

El reconocimiento y promoción de la LSM también implica el fomento de la capacitación de intérpretes, el acceso a servicios de interpretación en espacios públicos y la sensibilización de la sociedad hacia las necesidades y derechos de la comunidad sorda.

El proyecto mencionado destaca la relevancia de utilizar enfoques creativos y gamificados para enseñar la LSM, lo cual puede generar un mayor interés y participación por parte de la población en general. Los comentarios positivos recibidos demuestran el impacto que puede tener este tipo de iniciativas en la sensibilización y promoción de la LSM.

REFERENCIAS

- Blasco, H. (2021). El impacto de las redes sociales en las personas y en la sociedad: redes sociales, redil social, ¿o telaraña? *Tarbiya*, 49
<https://doi.org/10.15366/tarbiya2021.49.007>
- Colaboradores de Wikipedia. (2023). *Biografía de Lolita Ayala*. Wikipedia. https://es.wikipedia.org/wiki/Lolita_Ayala
- Escobedo, C. (2017). *Diccionario de Lengua de Señas Mexicana de la Ciudad de México*. Instituto para las Personas con Discapacidad de la Ciudad de México (INDEPEDI CDMX).
- Gaitán, V. (2013). *Gamificación: el aprendizaje divertido*. Educativa.
<https://www.educativa.com/blog-articulos/gamificacion-el-aprendizaje-divertido/>
- INJUVE Nuevo León. (31 de enero de 2020). Primer Sesión | #Curso Lengua de Señas Mexicana en Línea [Video en vivo] Facebook. https://www.facebook.com/INJUVE.NL/videos/primer-sesi%C3%B3n-curso-lengua-de-se%C3%B1as-mexicana-en-l%C3%ADnea-reg%C3%ADstrate-en-el-siguiente/179190463176618/?locale=es_LA
- Instituto Nacional de Administración Pública. (2018). La inclusión y los derechos de las personas con discapacidad y su incidencia en las políticas públicas. *Revista de Administración Pública* 53 (1)
- Secretaría de Salud. (2021). 530. *Con discapacidad auditiva, 2.3 millones de personas: Instituto Nacional de Rehabilitación*. <https://www.gob.mx/salud/prensa/530-con-discapacidad-auditiva-2-3-millones-de-personas-instituto-nacional-de-rehabilitacion?idiom=es>
- SE/ISEP. (s.f.). *Educación inclusiva para la atención del alumno sordo en Educación Básica. Secretaría de Educación y del Instituto de Servicios Educativos y Pedagógicos de Baja California, a través de la Subsecretaría de Educación Básica y la Coordinación Estatal de Educación Especial* [Archivo PDF] <https://www.educacionbc.edu.mx/wordpress/wp-content/uploads/2021/10/Lengua-de-Señas-Mexicana-en-Baja-California.pdf>
- Sergio [chequiino7]. (25 de julio de 2023). Jugando con lengua de señas mexicana, parte 1. TikTok. <https://www.tiktok.com/@chequiino7/video/7259816865864617222>
- Sergio [chequiino7]. (25 de julio de 2023). Jugando con lengua de señas mexicana, parte parte 2. Tiktok. <https://www.tiktok.com/@chequiino7/video/7259845466429328645>
- Universidad de Guadalajara. (2021). *Curso de lengua de señas mexicana nivel A1, especialización en el ámbito educativo*. <https://www.udg.mx/es/node/58070>

Análisis de microbiota rRNA 16s con el uso de herramientas bioinformáticas como DADA2 en R

SAULO HERIBERTO ARANDA TREJO
 saulo.aranda7168@alumnos.udg.mx

HAIKU DANIEL DE JESÚS GÓMEZ VELÁZQUEZ
 haiku@cuatitlan.unam.mx

RESUMEN

La microbiota intestinal desempeña un papel importante asociada con efectos benéficos a la salud del hospedero. La tecnología de secuenciación, de nueva generación, ha permitido el análisis de la microbiota con precisión. El objetivo de la presente investigación fue aplicar herramientas bioinformáticas para la enseñanza del análisis de la microbiota 16s mediante paqueterías de Rstudio como DADA2 y phyloseq. Primeramente, se empleó la paquetería Swirl para la enseñanza autónoma del lenguaje R y su funcionamiento. Los datos crudos de microbiota publicados por López-Hernández et al. (2023), disponibles en el NCBI como BioProject PRJNA945450, fueron empleados como ejemplo práctico en la enseñanza. Se obtuvo el procesamiento de datos mediante pipelines básicos para el filtrado, corte y alineamiento de las secuencias con el fin de asignar las taxonomías y variantes de secuencia del amplicón. Los datos de salida fueron en tablas con formato .csv. El usuario logró la construcción de diversos gráficos de abundancia de la población bacteriana de cada muestra, así como inferir sobre la diversidad alfa y beta con sus respectivos análisis estadísticos.

El aprendizaje de estas herramientas bioinformáticas proporciona una fortaleza para el análisis de metadatos genómicos, conocimientos esenciales para la experimentación y la asociación de los posibles efectos benéficos.

PALABRAS CLAVE

Bioinformática (bioinformatics), Microbiota 16s (16S microbiome), programa Rstudio (Rstudio), secuenciación de ADN (DNA sequencing), ecología microbiana (microbial ecology).

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, diversas investigaciones mencionan la importancia de la microbiota intestinal con efectos asociados a la salud (Kawabata et al., 2019). La microbiota son múltiples bacterias provenientes del intestino, por lo que existe una estrecha y muy compleja relación simbiótica en el eje microbiota-hospedador. Asimismo, esta participa activamente en la degradación o fermentación de alimentos altos en fibra, principalmente insoluble, que no puede ser absorbida ni metabolizada por el huésped (Mithul Aravind et al., 2021). La microbiota puede nutrirse y proveer múltiples productos de fermentación —metabolitos o macúlelas señalizadoras— que pueden ser absorbidos por los enterocitos del huésped, sirviendo de comunicación en la generación de energía, protección inmunológica, entre otras actividades (Daniel et al., 2021).

Cada individuo posee una comunidad microbiana particular que depende de su genotipo y de la exposición temprana a los microorganismos de su entorno, pero también de la dieta, los cambios de estilo de vida o la terapia frente a las infecciones (Álvarez et al., 2018). Firmicutes es un filo que ha sido ampliamente asociado con efectos benéficos a la salud, mientras que Bacteroidetes ha sido asociado con individuos que presentan alguna enfermedad metabólica (Kawabata et al., 2019). Por lo tanto, mantener una eubiosis con una mayor proporción Firmicutes/Bacteroidetes es un indicativo de una buena salud intestinal y hasta sistémica (Fontana et al., 2013).

Además, se ha observado que estos microorganismos proveen efectos benéficos en la regulación de diversas enfermedades metabólicas como lo es la obesidad y la resistencia a insulina (Daniel et al., 2021; Mithul Aravind et al., 2021). Diversos estudios han sido evaluados para tratar de mantener o modular la microbiota intestinal, muchos de ellos emplean la suplementación de alimentos ricos en fibra y compuestos bioactivos (Wang et al., 2022). Dentro de estos compuestos bioactivos se encuentran los polifenoles, los cuales modulan la microbiota y contribuyen a una mejora en la salud. Los polifenoles son metabolitos secundarios de las plantas que

presentan propiedades antioxidantes. Se encuentran en frutas, verduras, té verde, cereales, entre otros.

La ingesta de polifenoles dietéticos totales por día es de 1g siendo mayor a la de otros antioxidantes como la vitamina C y E o carotenoides. Los polifenoles se clasifican en ácidos hidroxí-cinámicos e hidroxibenzoicos, flavonoides, taninos y estilbenos (Mithul Aravind et al., 2021; Wang et al., 2022). Sin embargo, muchos de estos polifenoles se encuentran ligados a la fibra y son poco absorbidos en el intestino, por lo que llegan a colon donde fungen como precursores de la fermentación microbiana. Los polifenoles pueden inhibir el crecimiento de bacterias patógenas y favorecer el crecimiento de bacterias benéficas. Por ejemplo, los flavonoides del vino tinto y uva ayudan a la inhibición de cepas *clostridium*, mientras que el ácido elálgico y antocianinas contribuyen en la inhibición de ruminococcus. Al contrario, los taninos de granada, el gigerol del jengibre y otros polifenoles de sorgo promueven el crecimiento de las bifidobacterias (Kawabata et al., 2019).

De tal manera, caracterizar la microbiota resulta de suma importancia para identificar las poblaciones de microorganismos presentes en alguna enfermedad particular. Lo cual permite realizar investigaciones con enfoques terapéuticos y con fines a evaluar sus posibles efectos que beneficien la salud del huésped.

Para el estudio de la microbiota, tradicionalmente se ha realizado la identificación de bacterias por métodos convencionales como aislamiento por medio de cultivo en placa o en caldo. Para ello se han empleado diferentes agares o fórmulas, algunas de ellas muy especializadas y selectivas. No obstante, dicha práctica en ocasiones resulta compleja, puesto que se carece de agares o medios de cultivo que permitan aislar e identificar la vasta diversidad microbiana por estos métodos tradicionales. Inclusive aún se desconocen la taxonomía de múltiples bacterias (Hu et al., 2021).

Sin embargo, el descubrimiento de la secuenciación del ADN ha permitido la implementación de la bioinformática en el análisis e identificación de genomas de microbiota, y hoy en día, la secuenciación de nueva generación (NGS) permite la obtención de metadatos de genomas completos de manera precisa, relativamente rápida y eficaz (Hu et al., 2021).

Dentro de las NGS se encuentra la plataforma *Illumina Miseq*. Dicha secuenciación se basa en el enfoque de “secuenciación por síntesis (SBS)”, que

implica la incorporación de nucleótidos dependientes de la ADN polimerasa, enzima que duplica y amplifica ese material genético, en la cadena extendida de ADN. En este método, se toma una muestra de ADN y se fragmenta en segmentos más cortos que son anclados a una superficie sólida. Luego, se inicia un ciclo de síntesis donde se incorporan nucleótidos marcados con fluoróforos, y después de cada ciclo, se capturan imágenes para determinar la secuencia de cada fragmento. La secuenciación continúa ciclo tras ciclo, generando una gran cantidad de datos crudos que se traducen en información sobre la diversidad de la microbiota y las poblaciones bacterianas presentes en la muestra. Esta tecnología ha revolucionado el análisis de microbiota al proporcionar datos de alta calidad y profundidad en términos de pares de bases, con tamaños de datos crudos que pueden oscilar entre varios gigabytes a terabytes, dependiendo del número de secuenciaciones y la profundidad deseada para el estudio.

El análisis de microbiota por el gen rRNA, mediante *Illumina*, ofrece una profundidad de secuenciación, generando secuencias de hasta 300 pares de bases en longitud. Por lo que ha surgido una fuerte necesidad de conocer y aplicar herramientas bioinformáticas para poder satisfacer la vasta cantidad de información arrojada por las NGS para analizar datos de GB, y de tal manera identificar y clasificar taxonómicamente las comunidades bacterianas presentes en alguna muestra para después poder hacer inferencias.

Diversas plataformas de lenguaje de programación, como *R* o *Python*, han sido cada vez más empleadas para fines bioinformáticos, algunos de ellos son sumamente sofisticados y se requiere conocimiento avanzado del usuario sobre el software, código y aplicación. De tal manera, se han buscado estrategias para la enseñanza de estas herramientas para el análisis de microbiota, una de ellas puede ser el empleo de plataformas interactivas autónomas. En este sentido, existe una paquetería de código abierto denominada *Swirl* (<https://swirlstats.com/>) para la enseñanza autónoma del lenguaje de programación *R* (<https://cran.r-project.org/>) empleando el programa *Rstudio* (<https://posit.co/download/rstudio-desktop/>).

La programación en *R* es una habilidad común en los trabajos de ciencia de datos y análisis estadístico, procesamiento y visualización de estos (Vargas et al., 2021). Por su parte, *RStudio* es el principal entorno de desarrollo integrado (IDE), un software libre disponible para múltiples sistemas operativos. Un IDE

es un programa compuesto por 4 herramientas: editor de texto que no requiere de un formato específico, un compilador el cual es el encargado de traducir la órdenes de *R* y leerlas en un lenguaje de máquina y a posteriori ejecutarlas y arrojar un resultado.

La interfaz gráfica se divide en 2 áreas principales, el área de entrada y la de salida. El área de entrada, la consola es donde muestra todos los comandos escritos, los errores y advertencia. Además, el *script* es el editor de texto de *R* que nos permite escribir y ejecutar las órdenes que se les plantean.

Por otro lado, el área de salida se encarga de mostrar resultados, visualizar gráficos, presentar ayudas y manuales. Consta de la consola y el entorno de trabajo, donde se muestra los datos con los que se está trabajando, entre ellos, los objetos generados. La ventana de varios también es un área de salida, donde se nos muestra los datos con los que se está trabajando, entre ellos, los objetos generados. La ventana de varios también es un área de salida, donde se nos muestra las pestañas de gráficos y ayuda (Vargas et al., 2021). Por su parte, *Swirl* permite al usuario aprender de *R* su estadística y visualización de datos de forma interactiva y directamente de la consola de *Rstudio*.

Por lo tanto, el objetivo de la presente investigación fue la enseñanza de la programación en *R* mediante la paquetería *Swirl*. Subsecuentemente, emplear dichas herramientas bioinformáticas para el análisis de la microbiota 16s a través de *Rstudio* con un ejemplo práctico en el manejo de datos crudos tomados de lo publicado por López-Hernández et al. (2023). De tal manera, el usuario puede adquirir conocimiento basado en problemas de dichos análisis y el entendimiento integral de las herramientas bioinformáticas, así como sus fines prácticos, y por tanto, tener un análisis crítico del artículo publicado y del estado del arte actual con enfoque en el análisis de la microbiota.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para conocer la importancia del análisis de microbiota 16s, su identificación y clasificación taxonómica se utilizó el lenguaje de programación *R* y *RStudio*. Primeramente, se empleó la paquetería *Swirl*, la cual permite enseñar de manera autónoma las bases del lenguaje *R* y su funcionamiento por medio de 14 lecciones. Una vez adquirido este conocimiento, fueron evaluadas bases de datos crudos de secuenciación de genoma microbiota 16S del

artículo publicado por López-Hernández et al.. (2023) en la base de datos del NCBI como BioProject PRJNA945450.

Se utilizó la paquetería de DADA2, algoritmo que permite procesar los datos obtenidos de la secuenciación en formato fastq para su análisis. Se realizó el procesamiento de datos, que incluye filtrado y corte, estadística del modelo de error, remoción de errores y quimeras, así como alineamiento y pareado de las lecturas.

Asimismo, por medio de la paquetería Phyloseq (McMurdie & Holmes, 2013) y otras de *BioConductor* (<https://www.bioconductor.org/>) se visualizaron y analizaron estadísticamente las comunidades bacterianas identificadas de la muestra .

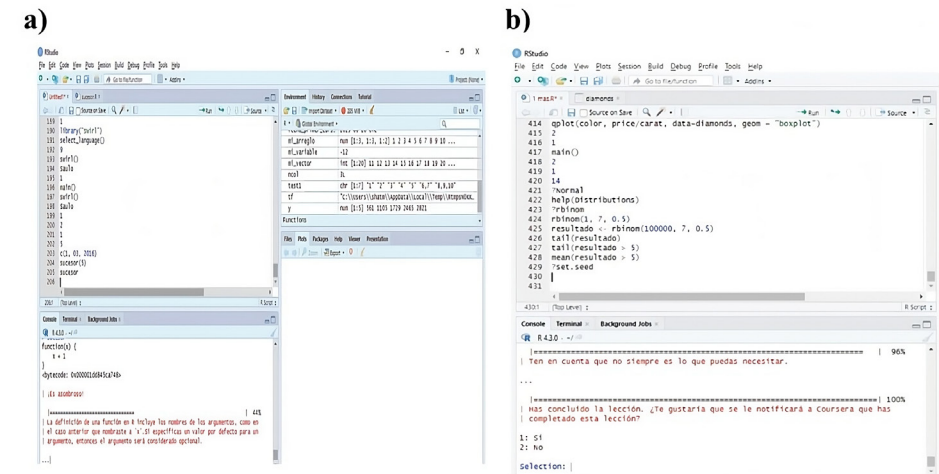
RESULTADOS

De la paquetería *Swirl* se logró familiarizarse con el lenguaje *R* y uso de *Rstudio*. En la Figura 1 se muestra un ejemplo de la interfaz del programa *Rstudio* donde se ejecutaron las lecciones de aprendizaje autónomo con la paquetería *Swirl*. Mediante estas lecciones se logró el aprendizaje de la programación basada en objetos en *R*, por ejemplo, la lección 1 trató sobre cómo solicitar ayuda a *Rstudio*. En la lección 2 y 3 se aprendió a distinguir los tipos de datos y operaciones básicas. En la lección 4, la lectura y escritura de datos fue cursada. Para la lección 5 y 6 se obtuvo el conocimiento básico sobre qué son y cómo programar algunas de las funciones en *R*. En las lecciones 7 a 10 se trató cómo graficar y emplear los *scripts* para visualizar algunas bases de datos, se adquirió la noción sobre el empleo de colores, tipos y parámetros de los gráficos. En la lección 11 y 12 se abordó el tema de gráficas en 3D. Por último, en la lección 13 se realizó la práctica de generación de gráficos de calidad mediante la introducción a *ggplot2*, una paquetería que facilita la ejecución de gráficos de bases de datos y la lección 14 consistió en la simulación de todos estos conocimientos.

Una vez que se concluyeron las lecciones introductorias de *R*, se contó con herramientas bases para ahora adentrarse al análisis de la microbiota. Para ello, se descargaron los datos crudos del trabajo publicado por López-Hernández et al. (2023). En este artículo los autores describen los efectos de la aplicación diferente voltaje (0.4 y 0.9 v) y sin la aplicación de voltaje (control) sobre la fermentación microbiana del líquido ruminal en una celda única de electrofermentación. Uno de los objetivos de dichos

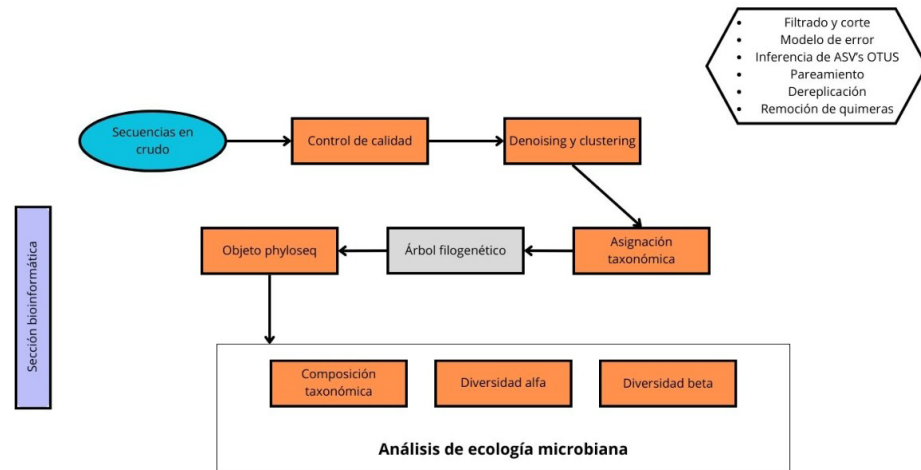
autores es sobre la influencia o los efectos del voltaje en la modulación de las comunidades bacterianas.

Figura 1. Interfaz del programa *Rstudio* dividida en ventanas, donde las dos de la derecha representan la edición y el entorno de trabajo, mientras las dos de la izquierda corresponde a la visualización de datos. Edición de la lección 1 (a) y 14 (b) de la paquetería *Swirl*



Los resultados del control de calidad de los datos crudos garantizaron la fiabilidad de las secuencias obtenidas. Estos controles incluyen la eliminación de secuencias de baja calidad, la corrección de errores y la *denoising*, lo que resulta en datos limpios y precisos. Las secuencias son un orden de las cuatro bases nitrogenadas del ADN, adenina (A), citocina(C), guanina (G) y timina (T). Estos procesos de control de calidad son esenciales para obtener resultados robustos y confiables en los estudios de microbiota 16S (Figura 2).

Figura 2. Flujo de procesamiento de datos de microbiota 16S mediante las paqueterías del modelo de DADA2 y phyloseq en Rstudio

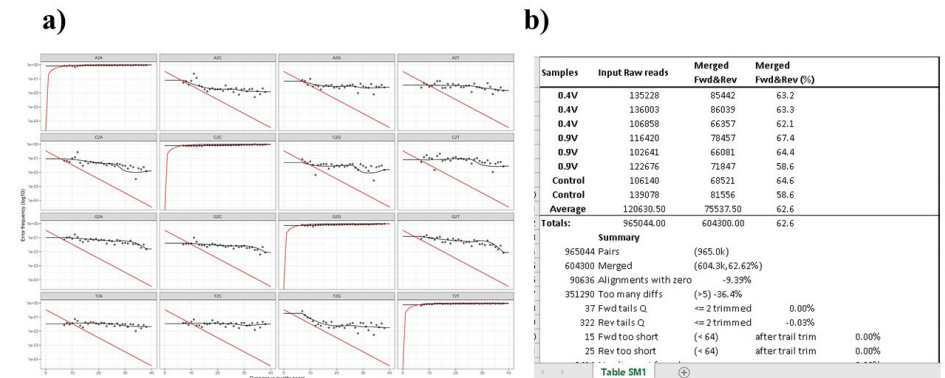


Con las paqueterías DADA2 se obtuvo el filtrado, corte y alineación de las secuencias de genomas 16S, asimismo, se construyó un modelo de error probabilístico para la asignación taxonómica de las secuencias tratadas por el preprocesamiento (Figura 3). Dicho modelo proporciona información sobre la calidad de las bases en los “reads” y se utiliza para corregir errores de secuenciación; en los gráficos, se leen las distribuciones de calidad de las bases nitrogenadas para evaluar su confiabilidad y decidir los cortes de calidad adecuados (Figura 3a). En este caso se utilizaron como parámetro de calidad de +33 Phred, estos son puntajes que evalúan la confiabilidad de cada base en una secuencia de ADN, representados en una escala logarítmica, donde valores más altos indican una mayor calidad y precisión en la secuencia.

Un total de las 965044 “reads” crudos entraron al análisis de datos y al final del procesamiento de estos se emparejaron las secuencias forward y reverse, obteniéndose 604300 reads finales, lo que representa un 62.6 % (Figura 3b). En la secuenciación de Illumina, “reads” se refiere a las secuencias de ADN que se generan a partir de la muestra analizada. Cada “read” es una secuencia corta de ADN que representa un fragmento de la muestra original. Estas deben ser pareadas y alineadas para así obtener la secuencia

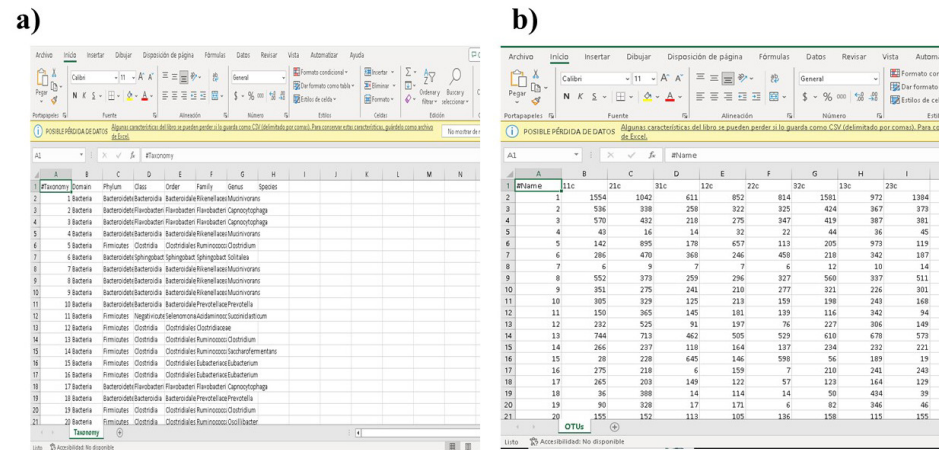
total de todo el genoma de la bacteria identificada y con ello poder asignar su taxonomía con ayuda de las bases de datos. En el presente análisis se empleó la base de datos de Silva_nr99 en su versión v_138.1 para asignar la taxonomía de los reads procesados de DADA2, construyendo así la tabla de taxonomía (Figura 4a).

Figura 3. Control de calidad y filtrado de las secuencias de los datos crudos. Gráficos del modelo de error generado por el algoritmo de DADA2 (a) y tabla de reads por muestra y grupo (b)



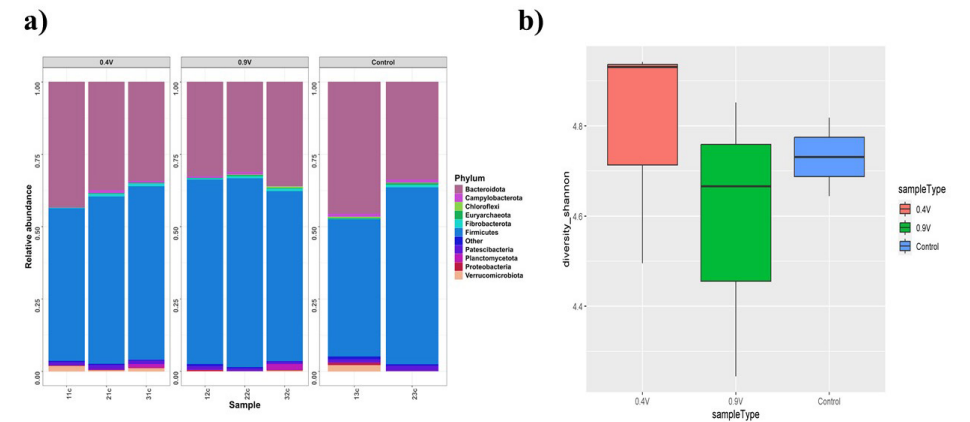
Previo a ello, se construyó la tabla de las variantes de secuencia del amplicon (ASV, Figura 4b). Cada uno de estos ASV identificados corresponden a una bacteria, esto es fundamental para la creación de la tabla de asignación taxonómica con el uso de DADA2. Con las paqueterías de *Phyloseq* se generó la visualización de los datos, así como sus análisis estadísticos de la diversidad microbiana y ecología presente en la muestra.

Figura 4. Tablas de asignación taxonómica y variantes de secuencia del amplicon obtenidas con el modelo de algoritmo de DADA2



Los datos corresponden a un experimento de electrofermentación, empleando diferentes voltajes como tratamientos y evaluando su efecto en la disbiosis (López-Hernández et al., 2023). De tal manera, se puede observar en la Figura 5 la abundancia relativa de las comunidades microbianas presentes en las muestras analizadas, en la cual hay una clara predominancia del filo Bacteroidetes y Firmicutes (Figura 5a). Asimismo, se realizaron diferentes análisis de ecología microbiana para identificar la diversidad alfa, en el trabajo publicado por López-Hernández et al. (2023) reportaron una nula existencia de diferencias entre las poblaciones bacterianas medida por la diversidad de Shannon. Lo cual en el presente ejercicio práctico pudimos corroborarlo (Figura 5b).

Figura 5. Abundancia relativa a nivel filo (a) y diversidad alfa medida por Shannon (b) de las poblaciones bacterianas (top 10) de muestras de líquido ruminal a través de la aplicación de voltaje en una celda de electrofermentación



La diversidad alfa, evaluada mediante la medida de *Shannon*, es un indicador de la riqueza y uniformidad de especies en una comunidad. Esta métrica considera tanto la cantidad de diferentes especies presentes como su abundancia relativa en un ecosistema. Cuanto mayor es el índice de *Shannon*, mayor es la diversidad, ya que refleja una comunidad en la que hay varias especies y ninguna domina completamente. Es una herramienta valiosa para comparar la diversidad biológica en diferentes hábitats y entender la complejidad de las interacciones en una comunidad. En otras palabras, representa la riqueza de la población bacteriana contenida en una muestra.

También se analizaron la diversidad beta, que indica si hay un cambio de la microbiota presente en una muestra por efecto de algún tratamiento (datos no mostrados). En este mismo trabajo los autores mencionan nula diversidad beta y concluyeron que los efectos de la aplicación del voltaje no alteran la robustez de la microbiota encontrada en el líquido ruminal, solo observaron cambios importantes en los productos de fermentación.

CONCLUSIONES

El uso de herramientas bioinformáticas a través de *R* permite el procesamiento de las bases de datos de las NGS, lo que facilita el análisis de la comunidad bacteriana contenida en una muestra. El aprendizaje de esta herramienta proporciona una mayor eficiencia en el análisis de este tipo de datos. Sin embargo, es necesario profundizar en el uso complejo de la bioinformática, aunque el uso de *Swirl* se muestra como una herramienta eficaz para su aprendizaje temprano.

Descifrar el código genético con la secuenciación de nucleótidos de datos sumamente pesados con la bioinformática con enfoque sobre la microbiota permite inferir en comunidades predominantes y ayuda para identificarlas y caracterizarlas. Esto permite realizar estudios sobre tratamientos a base de alimentos ricos en compuestos bioactivos que puedan modular la microbiota y así evaluar los posibles efectos benéficos en el control de enfermedades metabólicas. Por lo tanto, las herramientas bioinformáticas pueden ser empleadas en varias áreas de las ciencias químicas y de la vida como lo pueden ser la proteómica, transcriptómica y metabolómica.

REFERENCIAS

- Callahan, B. J., McMurdie, P. J., Rosen, M. J., Han, A. W., Johnson, A. J. A., y Holmes, S. P. (2016). DADA2 : High-resolution sample inference from Illumina amplicon data. *Nature Methods*, 13(7), 581–583. <https://doi.org/10.1038/nmeth.3869>
- Daniel, N., Lécuyer, E., y Chassaing, B. (2021). Host/microbiota interactions in health and diseases—Time for mucosal microbiology! *Mucosal Immunology*, 14(5), 1006–1016. <https://doi.org/10.1038/s41385-021-00383-w>
- Fontana, L., Bermudez, M., Plaza, J., Muñoz, S., y Gil, A. (2013). Sources, isolation, characterisation and evaluation of probiotics. *British Journal of Nutrition*, 109(SUPPL. 2). <https://doi.org/10.1017/S0007114512004011>
- Hu, T., Chitnis, N., Monos, D. y Dinh, A. (2021). Next-generation sequencing technologies: An overview. *Human Immunology*, 82(11), 801–811. <https://doi.org/10.1016/j.humimm.2021.02.012>
- Kawabata, K., Yoshioka, Y. y Terao, J. (2019). Role of Intestinal Microbiota in the Bioavailability and Physiological Functions of Dietary Polyphenols. *Molecules* 24(2), <https://doi.org/10.3390/molecules24020370>
- López, R., Cercado, B., Gómez, H. D. de J., Robles, C., González, L., Varela, A., Shimada, A., y Mora, O. (2023). Single-Chamber Electrofermentation of Rumen Fluid Increases Microbial Biomass and Volatile Fatty Acid Production without Major Changes in Diversity. *Fermentation*, 9 (6)

<https://doi.org/10.3390/fermentation9060502>

- McMurdie, P. J., y Holmes, S. (2013). Phyloseq: An R Package for Reproducible Interactive Analysis and Graphics of Microbiome Census Data. *PLoS ONE*, 8(4). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0061217>
- Mithul, S., Wichienchot, S., Tsao, R., Ramakrishnan, S. y Chakkaravarthi, S. (2021). Role of dietary polyphenols on gut microbiota, their metabolites and health benefits. *Food Research International*, 142 <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2021.110189>
- Wang, X., Qi, Y. y Zheng, H. (2022). Dietary Polyphenol, Gut Microbiota, and Health Benefits. *Antioxidants*, 11(6). <https://doi.org/10.3390/antiox11061212>

Aprovechamiento de residuos agroindustriales como prebióticos (vinaza, inulina, orujo y jamaica) para estimular el crecimiento del probiótico BPL-1 en la elaboración del yogurt

JOSELINE IBARRA CLEMENTE
joseline.ibarra4709@alumnos.udg.mx

MIGUEL ÁNGEL MONTES RODRÍGUEZ
miguel.montes7424@alumnos.udg.mx

JOEL DE JESÚS BARBA FRANCO
joel.barba7616@alumnos.udg.mx

RESUMEN

México enfrenta un problema significativo de obesidad y sobrepeso, que afecta a más del 75 % de los adultos y al 36.6 % de la población infantil. El yogurt es un alimento ampliamente valorado por los consumidores por ser un producto de fácil acceso y consumo, es apreciado por su contenido nutrimental como proteínas, vitaminas y minerales, así como por ser una fuente de probióticos. Entre los probióticos que se han añadido al yogurt se encuentra BPL-1, que se destaca por tener efectos positivos en indicadores de obesidad y sobrepeso; como reducción de la grasa visceral, y recubrimiento intestinal. Aunado a ello, la adición de prebióticos como la fibra puede incrementar los enormes beneficios de este producto. Durante el proceso de bebidas como lo son el tequila, vino y jugo, se generan desechos contaminantes; como vinaza, orujo y residuos de jamaica. Sin embargo, estos residuos tienen un rico contenido de compuestos como la fibra (considerada un prebiótico). Por lo anterior, la presente investigación buscó aprovechar los residuos de vinaza, orujo y Jamaica, así como la inulina, como fuente de fibra con efecto prebiótico en yogurt adicional al uso del probiótico con BPL-1. Los residuos de orujo e inulina presentaron un crecimiento adecuado de BPL-1, por el contrario, los residuos de

jamaica al 5 y 10 % afectaron de manera significativa los valores de pH reduciéndolo en 25 % y 37 %, lo que inhibió el crecimiento del probiótico y las bacterias ácido lácticas.

PALABRAS CLAVE

Residuos agroindustriales (agro-industrial waste), Yogurt (yogurt), Prebióticos (prebiotics), *Bifidobacterium lactis* (Bifidobacterium lactis), Probióticos (probiotics).

INTRODUCCIÓN

Las nuevas tendencias de mercado buscan tener alternativas más saludables para que los consumidores obtengan dietas más simples y benéficas a su salud, específicamente buscan combatir enfermedades de gran incidencia como lo es la obesidad. Al mismo tiempo, los productores del sector alimentario buscan ofrecer opciones innovadoras y sostenibles, aprovechando hasta los posibles “residuos” de parte del proceso que les puedan ser funcionales de una u otra manera.

Según la Food and Agriculture Organization (FAO) y Organización Mundial de la Salud (OMS) los probióticos son microorganismos vivos que, cuando se administran en cantidades adecuadas, confieren un beneficio a la salud del hospedero. Por ejemplo, el probiótico *Bifidobacterium lactis* (BPL-1), ha demostrado ser una estrategia sencilla e innovadora para combatir marcadores de obesidad y sobrepeso, así como, estudios realizados por Borgeraas *et al.*, (2017.) comprobaron que BPL-1 tiene efecto directo sobre la reducción de lípidos totales ($40.5\% \pm 2.4$) y triglicéridos ($27.6\% \pm 0.5$). Además, se sabe que la fibra es considerada como prebiótico (Collado-Amores, 2004) por lo que favorece el desarrollo de BPL-1, debido a su relación prebiótico-probiótico; entendemos por prebiótico según la Food and Agriculture Organization (FAO) y Organización Mundial de la Salud (OMS) al microorganismo vivo que, cuando se administra en cantidades adecuadas, confieren un beneficio a la salud. Por otro lado, un prebiótico a aquellas sustancias de la dieta que nutren a grupos seleccionados de microorganismos (entre ellos a los bifidobacterium) que habitan en el intestino favoreciendo el crecimiento de bacterias beneficiosas sobre las nocivas, como bien lo menciona World Gastroenterology Organisation (WGO), por ello ayuda a generar saciedad que consecuentemente los

resultados se verán reflejados sobre su estado físico, es decir, provoca una disminución de peso y por ende una forma de combatir la obesidad.

Los residuos agroindustriales de las industrias tequileras, jugos y vinos producen residuos de vinaza, jamaica y orujo los cuales son beneficiosos por su alto contenido fibra, así como la inulina. La vinaza tequilera, es un residuo que presenta una composición química alta en contenido de materia orgánica, así como en potasio y calcio, también como cantidades moderadas de nitrógeno y fósforo. En cuanto al orujo, es una mezcla de residuos sólidos de uva resultante del proceso del vino; como su piel, semilla y pulpa y en cuanto a contenido químico, puede contener cantidades altas de potasio y calcio y cantidades moderadas de fósforo, sodio, cloro, magnesio, azufre y potasio. La jamaica, específicamente sus cálices son ricas en antocianinas, que son compuestos antioxidantes responsables de generarles el color rojo o rosado característico. También tiene un alto contenido de vitamina C y ácido ascórbico, y así mismo, destacan su alto nivel de minerales como hierro, fósforo y calcio. Además, todos estos residuos de vinaza, orujo, jamaica e inulina son productos ricos en fibra (12.79, 60.0,33.9 y 89 % respectivamente), los que los hace buenos prebióticos para el crecimiento de BPL-1 (Sáyago-Ayerdi *et al.*, 2007; Deng *et al.*, 2011 y Martínez-Castillo, 2023).

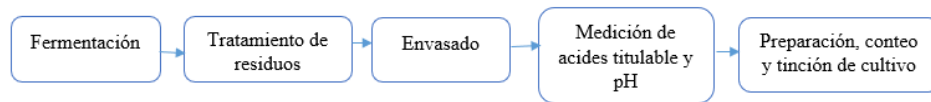
Sin embargo, es importante evaluar la formulación del producto para asegurar la compatibilidad entre los prebióticos propuestos y el BPL1, y con ello el crecimiento de este último. Por lo anterior, producir un yogurt probiótico con la adicción de BPL1 y un residuo agroindustrial, como la vinaza, orujo, jamaica e inulina, sería una prometedora opción al estar creando un producto que sea funcional y saludable para el consumo humano, enfocado a ayudar a combatir enfermedades como los son la obesidad y sobrepeso, además de seguir siendo un producto viable y de fácil acceso para el mercado y consumidores respectivamente.

Por todo lo anterior mencionado, el objetivo de este estudio es evaluar la viabilidad de un yogurt adicionado con residuos agroindustriales (prebióticos) como sustrato para el crecimiento de *Bifidobacterium lactis* (BPL-1) como probióticos.

MATERIALES Y MÉTODOS

El procedimiento de elaboración de yogurt con BPL-1 adicionado con residuos se describe en la figura 1.

Figura 1. Diagrama explicativo del diseño experimental para la elaboración de yogurt con BPL-1 adicionado con residuos agroindustriales



ELABORACIÓN DEL YOGURT

Se utilizó leche entera de vaca comercial, la cual se calentó a 43 ° C, para posteriormente realizar la fermentación. Durante la inoculación, se utilizó el fermento láctico DANISCO (*Streptococcus thermophilus* y *Lactobacillus delbrueckii subespecie bulgaricus*), donde por cada litro de leche usaron 0.29 g de éste. Luego de ello, se mantuvo la temperatura a 43 ± 2° C, la cual es la idónea para lograr el proceso de fermentación, fue monitoreada a la hora 3 y 6, en donde se midió el pH y acidez de la muestra.

El yogurt se dividió en, control (1L) y a los 3L restantes se le agregó 90mg (1x10⁵ UFC) de BPL1. Se mezcló vigorosamente con una cuchara esto para evitar la presencia de grumos en la mezcla, al mismo tiempo se va enfriando, hasta llegar a mantener una temperatura de 15° C.

Tratamiento de residuos

Los residuos de jamaica y orujo fueron molidos con ayuda de un Moulinex, y se tamizaron (tamiz N° 50), con la finalidad de estandarizar el tamaño de partícula. Posteriormente los cuatro residuos (jamaica, orujo, inulina y vinaza) fueron sometidos a luz ultravioleta durante 15 minutos para reducir el riesgo microbiológico (Millan *et al.* 2015).

Envasado

Se añadió 300 ml de yogurt a botellas que contenían los residuos de vinaza 10 % (V-10 %), vinaza 5 % (V-5 %), inulina 10 % (I-10 %), inulina 5 % (I-5 %), jamaica 10 % (J-10 %), jamaica 5 % (J-5 %), orujo 10 % (O-10 %) y orujo 5 % (O-5 %) como control se utilizó solo yogurt con BPL-1.

Determinación de acidez titulable, pH y viscosidad

La acidez fue determinada mediante el método colorimétrico con el uso de fenolftaleína y el pH de manera potenciométrica (Mex-Alvarez, 2022).

Para ello se tomaron 20 ml de la muestra en un matraz y se agregaron 3 gotas de fenolftaleína y finalmente se realizó la titulación con NaOH 0.1 N hasta que la muestra alcanzó un pH de 8.3 (AOAC, 2000). La viscosidad fue determinada con el uso de un viscosímetro (Thermo Electron VT2-Plus), donde se utilizaron 500 ml de muestra y se usó la aguja # 1.

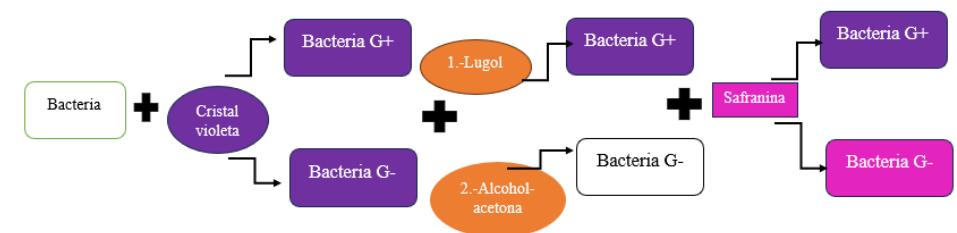
Preparación del cultivo

Se colocaron 20 µl de azul de tripano (0.4 %) en un portaobjetos y 20 µl de la muestra y se disolvieron. De esta mezcla se tomaron 20 L y se colocaron en una cámara de Neubauer para contar en un contador celular (Cytosmart). Para el cultivo de bifidobacteria se mezclaron 30.57 g de agar MRS y se enriqueció con 0.025 g de cisteína (MRS-Cys 0.5 %). Posteriormente, se sembró 1 ml de la muestra en condiciones de anaerobiosis. Al terminar se incubó en una jarra de anaerobiosis a 35° C durante 48 h. Los resultados se expresaron como UFC por ml de muestra.

CONTEO Y TINCIÓN DE CULTIVO

Los cultivos se tiñeron con tinción Gram, para ello se fijó en un portaobjetos un frotis cultivo BPL-1 con una pequeña gota de agua destilada y calor (hacer movimientos en zigzag por encima de la llama del mechero). Para la tinción, primero se agrega el cristal violeta, en segundo el lugol, se preparó una mezcla Alcohol:acetona 1:9 (decolorante) y por último agregamos safranina (Figura 2).

Figura 2. Diagrama del procedimiento para la identificación mediante tinción Gram



RESULTADOS

Se elaboraron 4 L de yogurt, mediante el uso de leche entera de vaca comercial (libre de riesgos químicos y microbiológicos) que contenía 3.0 % de grasa, 13 de sólidos totales. La leche comercial se calentó hasta llegar a 43° C en agitación constante para evitar la formación de nata por la separación de la propia grasa en la leche, posteriormente se inoculó con fermento láctico (*Streptococcus thermophilus* y *Lactobacillus delbrueckii subespecie bulgaricus*), el cual además de producir ácido fórmico de 10-30 ppm, para estimular a los *Lactobacillus*, puede también llegar a producir ácido pirúvico y CO₂. (Jimenez & Sarmiento, 2015). El aumento de acidez en el yogurt por la producción de ácido láctico ocasiona la coagulación de la caseína. Durante la fermentación el pH del yogurt disminuyó de 6.5 hasta llegar a 4.66, según la literatura, la disminución del pH es una de las propiedades principales el cual contribuye al olor y sabor característico (Illescas 2001). Además, no se logró observar diferencias entre el yogurt con probiótico y sin probiótico (control) en los valores de pH 4.66. Por su parte, la acidez final fue 7.42 sin encontrar diferencias entre el yogurt control y yogurt con BPL-1, el incremento de acidez durante la fermentación es ocasionado por actividad de las bacterias ácido-lácticas que generan el incremento de ácido láctico en las muestras, esto ocasiona cambios en la estructura de proteínas como la caseína. El lactobacilo es proteolítico, obtiene ciertos aminoácidos de la caseína que activan el crecimiento de los estreptococos. Después, la acción caseolítica de los lactobacilos mantiene el crecimiento de los estreptococos, que progresivamente son reemplazados por los lactobacilos (Jimenez & Sarmiento, 2015). El cambio estructural de proteínas como caseína genera un cambio en la viscosidad del yogurt; que para la muestra control fue de 1.12 DPa y para la muestra con el bífido de 1.26 DPa.

Al finalizar el tiempo de fermentación, el yogurt se enfrió en un baño de hielo con agitación constante, con la finalidad de evitar la formación de sinéresis y grumos en las muestras. Posteriormente, fue envasado en botellas que contenían el residuo agroindustrial esterilizado con luz UV (para las muestras al 5 % se añadieron 15 g y para las del 10 %, se agregaron 30 g) y después 300 g de yogurt y se mezcló; cuando la luz UV se encuentra con un microorganismo penetra en su ADN, destruyendo los enlaces adenina y timina inactivando eficazmente bacterias, virus, esporas y mohos, evitando que se multipliquen y causen infecciones

(Millan *et al.* 2015). La adición de residuos de jamaica, orujo y vinaza tuvieron efecto sobre el color del yogurt (Figura 3), siendo más notorio en las muestras que contenían la proporción del 10 % de residuo, lo anterior, se podría relacionar principalmente a la presencia de metabolitos secundarios presentes en los residuos. Por ejemplo, compuestos fitoquímicos como las antocianinas, principalmente la *delphinidina-3-O-sambubiósido* (hibiscina), *delphinidina-3-O-glucosido*, y *cyanidina-3-O-sambubiósido* en jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) le confieren el característico color rojo (Babalola *et al.*, 2001; Salazar-González *et al.*, 2012). Por su parte, el residuo de orujo confiere una tonalidad ligeramente violeta al yogurt, esto podría atribuirse al contenido de sus pigmentos, principalmente antocianinas como cianidina 3-O-acetil hexaóxido, malvidina 3-O-acetil hexósido y malvidina 3-O-coumaroil presentes en la uva y el orujo (Martinez-Meza, 2021). Además, el yogurt al que se añadió jamaica y orujo presentaron precipitado, ya que estos residuos son insolubles en yogurt y leche por su alto contenido de fibra, ya que orujo puede contener hasta un 60 % de fibra (Deng *et al.*, 2011) y jamaica hasta un 33.9 % (Sáyago-Ayerdi *et al.*, 2007).

Figura 3. Yogurt con probiótico *Bifidobacterium lactis* (BPL-1) adicionado con diferentes subproductos de orujo (O), jamaica (J), inulina (I) y vinaza (V). De izquierda a derecha O-10 %, O-5 %, J-5 %, J-10 %, I-10 %, I-5 %, V-10 %, V-5 %, yogurt con BPL1, control



Además, la adición de los residuos agroindustriales afectó los valores de pH y acidez de las muestras de yogurt. Jamaica fue el residuo agroindustrial con mayor impacto sobre los parámetros antes mencionados, ocasionando una

acidificación de las muestras, esto se pudo observar a través del aumento de la acidez titulables en 124 % y 160 % y una disminución del pH en 25 % y 37 % para las muestras J-5 % y J-10 % respectivamente. Además, se pudo observar que la adición de orujo logró cambios en valores de pH y acidez, aunque en menor proporción que la jamaica, existiendo un incremento de la acidez de 38 % y 33 % y una disminución del pH de 10 % y 11 % para las muestras O-5 % y O-10 % respectivamente (Tabla 1). Por su parte, los residuos de vinaza e inulina no modifican significativamente los valores de pH y acidez al momento de adicionarlo a yogurt.

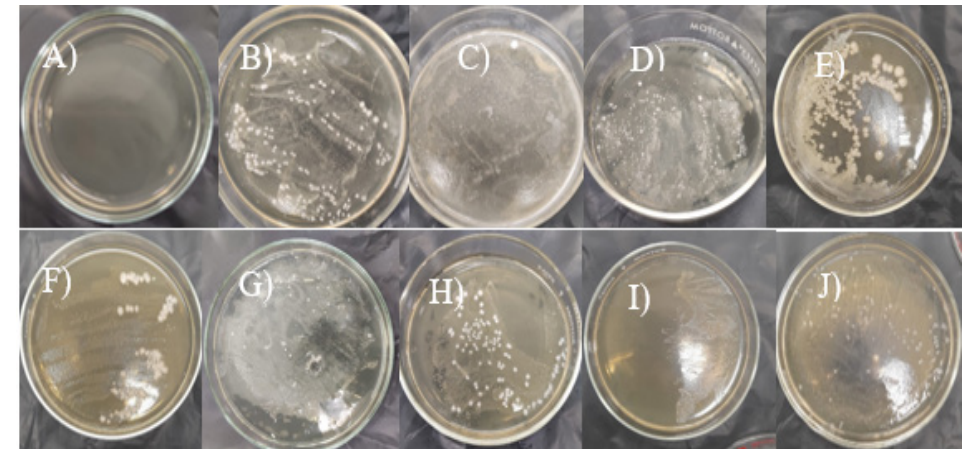
Tabla 1. Resultados de pH y acidez de las muestras de yogurt con BPL1 adicionado con residuos agroindustriales

Muestra	pH	Acidez (g/L)
Control	4.66	7.42
J-5 %	3.46	16.65
J-10 %	2.90	19.35
O-5 %	4.23	10.26
O-10 %	4.11	9.90
V-5 %	4.62	8.01
V-10 %	4.48	8.68
I-5 %	4.66	7.65
I-10 %	4.72	6.61

El crecimiento de BPL-1 en MRS-Cys se puede observar en la Figura 4, donde se visualizó que conforme se incrementa las concentraciones los residuos principalmente de orujo (Figura 4 F y E), vinaza (Figura 4 H y G) e inulina al 5 y 10 % (Figura 4 I y J) incrementa las unidades formadoras de colonias, por los que se puede asumir una correlación positiva entre los residuos agroindustriales de inulina, orujo y naza y el crecimiento de BPL-1. Por su parte, los cultivos de jamaica presentaron poco crecimiento del probiótico, esto lleva a pensar que hay una correlación negativa de BPL-1 con dicho residuo; lo anterior, se puede deber a que estas muestra tuvieron los pH más bajos lo cual afectó la viabilidad del probiótico, ya que de acuerdo a el


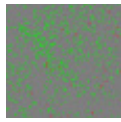



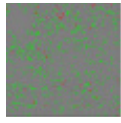


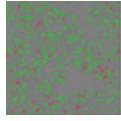
correcto manejo y cuidado de este probiótico, el pH óptimo de desarrollo para bifidobacterium oscila entre 5-7 y, a pH menores de 4.0 el crecimiento de éste será lento o incluso nulo, así mismo las colonias tienen una forma redondeada, así como un diámetro variado (Collado-Amores, 2004).

Figura 4.- Cultivos en MRS-Cisteína 5 % donde: A) blanco, B) Control, C) J-5 %, D) J-10 %, E) O-10 %, F) O-5 %, G) V-5 %, H) V-10 %, I) I-5 % y J) I-10 %



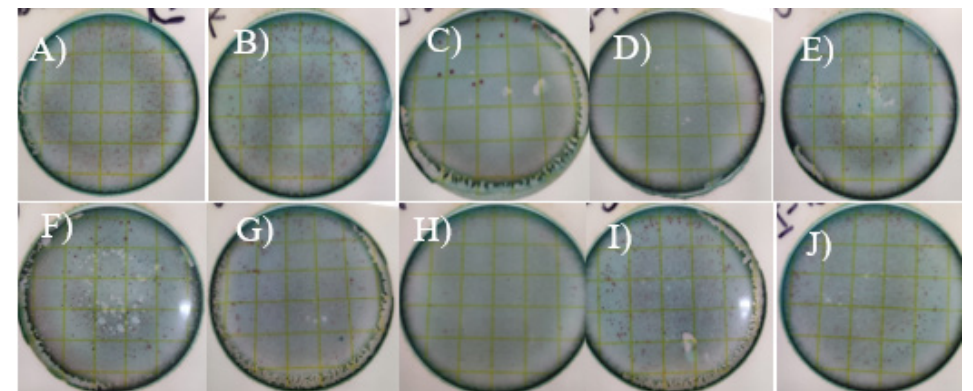
La viabilidad de las colonias obtenidas a través de la siembra directa en MRS-Cys fueron caracterizadas mediante la técnica de azul de tripano. Los resultados son mostrados en la tabla 2 donde se observa que los residuos de orujo (O-5 % y O-10 %), inulina (I-5 % y I-10 %) y vinaza (V-5 % y V-10 %) tuvieron una viabilidad igual o mayor al control, esto tiene relación estrecha ya que fueron las muestras que presentaron mejor crecimiento en placa (MRS-Cys). Por su parte, la muestra J-10 % presentó el crecimiento menor en placa y aunado a ello con la menor viabilidad. Es importante resaltar que los residuos de inulina y orujo son los que presentan mayor contenido de fibra 89 y 60 % respectivamente (Martínez-Meza, 2022), fueron los que tuvieron un mejor desarrollo de BPL-1 por lo que se infiere que la fibra podría ser otro parámetro importante en el establecimiento de BPL-1 en yogurt.

Tabla 2.- Viabilidad de crecimiento y cuenta de *Bifidobacterium lactis* (BPL-1)

Muestras	Imagen	Total de células	Viabilidad
Control		4.86x10 ⁶	88.8 %
J-5 %		1.22x10 ⁷	96.96 %
J-10 %		9.18x10 ⁶	84.75 %
O-5 %		1.04x10 ⁷	87.1 %
O-10 %		6.93x10 ⁶	93.86 %
V-5 %		1.13x10 ⁷	92.05 %
V-10 %		1.08x10 ⁷	93.96 %
I-5 %		8.80x10 ⁶	90 %
I-10 %		1.06x10 ⁷	96.43 %

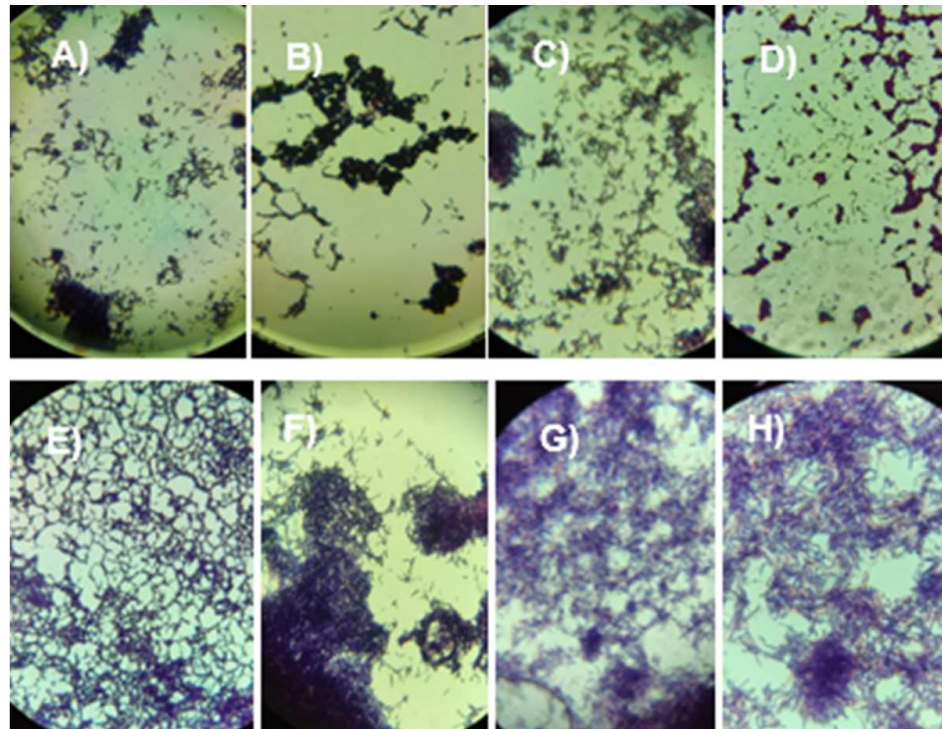
Según la NOM-181-SCFI-2010 el yogurt es una fermentación láctica específicamente producida por *Streptococcus thermophilus* y *Lactobacillus delbrueckii* subespecie *bulgaricus*. Esta Norma Oficial Mexicana establece las especificaciones microbiológicas, fisicoquímicas (proteína 2.9 %, grasa butírica 15, sólidos no grasos 8.25 % y acidez titulable mayor a 0.5 %) y nutrimentales. Debido a lo anterior se analizó el contenido de bacterias ácido lácticas donde los yogures producidos con residuo de orujo (O-5 % y O-10 %), inulina (I-5 % y I-10 %), V-5 % y control BPL-1 (Figura 5), tuvieron más de 7 logaritmos de bacterias ácido lácticas, además, de acuerdo a la declaración de la leche comercial los valores de fisicoquímicos están dentro de la NOM-181-SCFI-2010. Por su parte, el yogurt con jamaica (J-5 % y J-10 %) no cumplió lo establecido en la Norma Mexicana, debido a la inhibición de bacterias ácido lácticas en el yogurt.

Figura 5.- Cultivos en donde: A) control, B) control BPL-1, C) J-5 %, D) J-10 %, E) O-5 %, F) O-10 %, G)V-5 %, H) V-10 %, I) I-5 % y J) I-10 %



Los resultados obtenidos en tinción Gram de los cultivos en MRS-Cys evidencian la presencia de bacilos gram positivos en todas las muestras (Figura 6). De acuerdo a la literatura, BPL-1 es considerado un bacilo de variada morfología; pueden ser cortos, regulares y/o con ramificaciones. Además son Gram-positivos y se tiñen irregularmente con azul de metileno. Son anaerobios estrictos, sin embargo el grado de tolerancia al oxígeno depende de la especie y del medio de cultivo (Collado-Amores, 2004)

Figura 6.- Micrografías de tinción Gram donde: A) J-5 %, B) J-10 %, C) O-10 %, D) O-5 %, E)V-5 %, F) V-10%, G) I-5 % y H) I-10 %



CONCLUSIONES

La adición de residuos agroindustriales como el orujo, vinaza e inulina a concentraciones de hasta 10 % son una alternativa viable como prebiótico para el desarrollo del probiótico BPL-1. Las muestras de residuos agroindustriales de jamaica modifican condiciones fisicoquímicas como el pH y la acidez, por lo que no resulta viable para el crecimiento del probiótico BPL-1. Cabe resaltar que muestras del yogurt con residuos de orujo se mostraron precipitados, por lo que surge la necesidad de trabajar en la formulación del yogurt o modificarlo a una presentación de tipo batido. Por último, se sugiere en un futuro evaluar dichas muestras modificando la formulación del yogurt por uno de mayor viscosidad en vida de anaquel y aceptabilidad sensorial.

REFERENCIAS

- AOAC (2000) Official Methods of Analysis. *The Association of Official Analytical Chemists* (17).
- Babalola, S. O., Babalola, A. O. y Aworth, O. C. (2001). Composition attributes of the calyces of roselle (*Hibiscus sabdariffa* L.). *The Journal of Food Technology in Africa* 6 133-134.
- Borgeraas, H., Johnson, L. K., Skattebu, J., Hertel, J. K. y Hjelmessaeth, J. (2018). Effects of probiotics on body weight, body mass index, fat mass and fat percentage in subjects with overweight or obesity: a systematic review and meta-analysis of randomized controlled trials. *Obesity Reviews* 19 (2), 219-232.
- Carreras, N. L., Martorell, P., Chenoll, E., Genovés, S., Ramón, D. y Aleixandre, A. (2018). Anti-obesity properties of the strain *Bifidobacterium animalis* subsp. *lactis* CECT 8145 in Zucker fatty rats. *Beneficial Microbes* 9(4), 629-641.
- Collado Amores, M.C. (2004). *Caracterización de cepas del género Bifidobacterium con carácter probiótico* [Tesis de Doctorado, Universitat Politècnica de Valencia]
- Deng, Q., Penner, M. H. y Zhao, Y. (2011). Chemical composition of dietary fiber and polyphenols of five different varieties of wine grape pomace skins. *Food Research International*, 44 (9), 2712-2720.
- Galicia, L. A., Salinas, Y., Espinoza, B. M., y Sánchez, C. (2008). Caracterización fisicoquímica y actividad antioxidante de extractos de jamaica (*Hibiscus sabdariffa* L.) nacional e importada. *Revista Chapingo. Serie Horticultura*, 14 (2), 121-129.
- Gibson, G.R. y Roberfroid, M.B. (1995). Dietary modulation of the human colonic microbiota: introducing the concept of prebiotics. *J Nutr* 125 (6) 1401-1412
- Jimenez S. y Sarmiento P. (2015). *Curso Leche Racve* 3. Instituto Tomas Pascual.
- Fontané, L., Benaiges, D., Goday, A., Llauredó, G. y Botet, J. (2018). Influence of the microbiota and probiotics in obesity. *Clínica E Investigación En Arteriosclerosis (English Edition)*, 30 (6), 271-279.
- Martínez, L. M., Bustos, M. G., Trujillo, D., Castillejos, G. R. y Castillo, O. (2023). Caracterización de vinazas de la industria tequilera para su uso como medios nutritivos económicos en fermentaciones con bacterias lácticas. *Investigación y Desarrollo en Ciencia y Tecnología de Alimentos*, 8 (1), 795-801.
- Martínez-Meza, Y (2021). Aplicación de descompresión instantánea controlada (DIC) para mejorar la biodisponibilidad de bioactivos de subproductos de mango y uva para el control de la obesidad y sus complicaciones [Tesis de doctorado, Universidad Autónoma de Querétaro]
- Martorell, P., Llopis, S., González, N., Chenoll, E., López, N., Aleixandre, A., Chen, Y., Karoly, E. D., Ramón, D. y Genovés, S. (2016). Probiotic Strain *Bifidobacterium animalis* subsp. *lactis* CECT 8145 Reduces Fat Content and Modulates Lipid Metabolism and Antioxidant Response in *Caenorhabditis elegans*. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 64 (17) 3462-3472.

- Mex-Álvarez, R. M. J., Guillen, M.M y Ceh-Ac, C.A. (2022). Microtitulación para la determinación de la acidez titulable de tés (*Camellia sinensis*). *RIDE. Revista Iberoamericana para la Investigación y el Desarrollo Educativo*, 12(24)
- Millán, V., González, R., Brito, L., Ramos-Villarroel, M. e Yndira, A. (2015). Luz ultravioleta: inactivación microbiana en frutas. *Universidad de Oriente* 27 (3) 454-469.
- Pedret, A., Valls, R. M., Calderón, L., Llauroadó, E., Companys, J., Pla- Pagà, L., Moragas, A., Martín, F., Ortega, Y., Giralt, M., Caimari, A., Chenoll, E., Genovés, S., Martorell, P., Codoñer, F. M., Ramón, D., Arola, L. y Solà, R. (2018). Effects of daily consumption of the probiotic *Bifidobacterium animalis subsp. lactis* CECT 8145 on anthropometric adiposity biomarkers in abdominally obese subjects: a randomized controlled trial. *International Journal of Obesity* 43(9) 1863–1868.
- Rivera, R. y Matheus, R. (2023). Elaboración de yogurt con probióticos (*Bifidobacterium spp.* y *Lactobacillus acidophilus*) e inulina. *Revista de La Facultad de Agronomía* 26 (2), 223–242.
- Salazar, C., Vergara, F. T., Ortega, A. E. y Guerrero, J. Á. (2012). Propiedades antioxidantes y color de extractos de *Hibiscus sabdariffa*. *Ciencia e investigación agraria* 39 (1), 79-90.
- Sáyago, S. G., Arranz, S., Serrano, J.y Goñi, I. (2007). Dietary fiber content and associated antioxidant compounds in roselle flower (*Hibiscus sabdariffa* L.) beverage. *J. of Agricultural and Food Chemistry*, 55(19), 7886- 7890.

Evaluación del efecto de la adición de aceites esenciales de canela (*Cinnamomum Verum*) y manzanilla (*Matricaria Chamomilla L.*) en el yogurt sobre parámetros fisicoquímicos y microbiológicos

LUCERO MÁRQUEZ GONZÁLEZ
lucero.marquez2435@alumnos.udg.mx

MIRIAM XIMENA CARMONA FIGUEROA
miriam.carmona7167@alumnos.udg.mx;

JOEL DE JESÚS BARBA FRANCO
joel.barba7616@alumnos.udg.mx

XOCHITL APARICIO FERNÁNDEZ
xochitl.aparicio@academicos.udg.mx

RESUMEN

Más de 600 millones de personas en el mundo consumen lácteos por sus diversos beneficios a la salud, destacando su contenido de probióticos que beneficia la salud intestinal y al sistema inmunológico del ser humano. Por otra parte, durante el periodo de vida útil del yogurt es muy frecuente el crecimiento de microorganismos patógenos, así como de los que deterioran sus propiedades fisicoquímicas y reológicas y lo hacen peligroso de consumir. Por tanto, es importante la búsqueda de alternativas naturales para prolongar la vida de anaquel del yogurt, donde destacan los aceites esenciales (AE) de manzanilla y canela, que han despertado interés por su potencial antifúngico, antimicrobiano y bioconservador. El objetivo del presente proyecto fue evaluar el efecto de la adición de aceites esenciales de canela y manzanilla sobre los parámetros sensoriales, fisicoquímicos y microbiológicos del yogurt natural. Los nutrientes obtenidos en los yogures adicionados con AE y natural estuvieron dentro de los parámetros esperados para grasa (3.6 – 3.7 %), humedad (87 – 88 %), sólidos totales

(12 – 13 %) y cenizas (0.8 – 0.95 %) en todas las muestras. Además, la adición de AE de canela evitó la formación de sinéresis en las muestras. Por último, los análisis de coliformes, aerobios totales, mohos y levaduras estuvieron dentro de la norma hasta los 35 días de vida de anaquel.

PALABRAS CLAVE

Yogurt (yogurt), aceites esenciales (essential oils), *Cinnamomum verum*, *Matricaria chamomilla*, antimicrobiano (antimicrobial).

INTRODUCCIÓN

Los productos lácteos son considerados de gran interés alimenticio para el ser humano, ya que proporcionan muchos beneficios, tal es el caso del yogurt que es una excelente fuente de proteínas, vitaminas y minerales, además de ser un alimento probiótico. Por otro lado, el porcentaje de pérdidas y desperdicios productos lácteos corresponde al 20 % (FAO, 2017), el cual ha incrementado en los últimos años, por ejemplo, el desperdicio de alimentos el año 2021 fue del 25 % (Nielsen *et al.*, 2021). A lo largo de la vida útil del yogurt es frecuente el desarrollo de microorganismos patógenos como *Staphylococcus aureus*, *Salmonella spp.*, *Listeria monocytogenes*, *Escherichia coli*, entre otros; los cuales modifican sus propiedades nutricionales, fisicoquímicas y microbiológicas y lo hace no apto para su consumo, provocando grandes pérdidas económicas. Debido a esto, la industria ha hecho uso de conservadores sintéticos para mantener las propiedades y prolongar la vida de los alimentos; por lo general utilizan distintos tipos de conservadores de manera simultánea para mantener al producto estabilizado, lo que trae como consecuencia efectos secundarios significativos para la salud del consumidor (Dwivedi *et al.*; 2017). Aunado a ello, las nuevas exigencias por parte de los consumidores por productos más naturales han llevado a una disminución de conservadores sintéticos. Ante esta situación se ha generado la búsqueda de alternativas naturales para reducir el uso de los conservadores sintéticos con el fin de inhibir el crecimiento microbiano y prolongar la vida de anaquel de los alimentos. Si bien, las bacterias ácido-lácticas son conservadores naturales por la capacidad de producir en condiciones apropiadas compuestos antimicrobianos, el daño continúa siendo muy alto; por lo que se ha optado por los conservadores naturales.

Los aceites esenciales (AE) son extraídos de especias y plantas, y han despertado interés por sus propiedades antimicrobianas, antioxidantes, inmunomoduladoras, antifúngicas, ansiolíticas, entre otras (Maurya *et al.*, 2021), lo que los vuelve idóneos como bioconservadores. Éstos son mezclas complejas de compuestos volátiles que las plantas aromáticas producen como metabolitos secundarios, por lo que se caracterizan por sus fuertes olores (Ríos, 2016). Su propiedad antimicrobiana se relaciona a la presencia de mezclas variables de compuestos bioactivos, principalmente terpenoides. Los terpenos, especialmente monoterpenos y sesquiterpenos, tienen una función importante inhibiendo ciertos patógenos (Valdivieso-Ugarte *et al.*, 2019). Específicamente los monoterpenoides intervienen en procesos fisiológicos y bioquímicos de los microorganismos ocasionando la interrupción de su multiplicación (Pandey *et al.*, 2017). Algunos AE también pueden contener compuestos no terpénicos con propiedad antimicrobiana, como el eugenol y el cinamaldehído, capaces de inhibir el crecimiento de *E. coli*, *Salmonella spp.*, *S. Typhimurium*, *Listeria monocytogenes*, *Staphylococcus aureus*, entre otros; así como el safrol que inhibe *Pseudomonas aeruginosa*, *Enterococcus faecium* y *Proteus vulgaris* (Friedman, 2017). El AE de canela (*Cinnamomum verum*) ha demostrado tener actividad antimicrobiana, antioxidante, antiinflamatoria, ansiolítica, entre otras (Pathak & Sharma, 2021). Además, se ha utilizado como conservante de alimentos para inhibir el crecimiento de especies de hongos como *Rhizopus nigricans*, *Aspergillus flavus* y *Penicillium expansum* (Xing *et al.*, 2010) y bacterias como *L. monocytogenes* y *S. Typhimurium*; y también debido a su poder antioxidante (Mortazavi & Aliakbarlu, 2019). Por otro lado, los AE y extractos de manzanilla (*Matricaria chamomilla* L.) han mostrado tener actividad antioxidante, antibacteriana, antifúngica, anticancerígena, antidiabética, antiparasitaria, antiinflamatoria, antidepresiva, antipirética, antialérgica y analgésica (El Mihaoui *et al.*, 2022). Algunos estudios muestran que el AE de manzanilla inhibe el crecimiento de microorganismos como *P. aeruginosa*, *S. aureus*, *Candida sp.*, *Aspergillus sp.* y *E. coli* (Caleja *et al.*, 2015). Lo anterior deja claro que los AE son una excelente propuesta para combatir los daños ocasionados por los microorganismos en los productos lácteos. Por lo que el objetivo de este proyecto fue evaluar el efecto de la adición de aceites esenciales de canela y manzanilla sobre yogurt natural y determinar el efecto sobre sus parámetros fisicoquímicos y vida de anaquel.

MATERIALES Y MÉTODOS

OBTENCIÓN DE MATERIALES

Las muestras de leche bronca se obtuvieron de establos locales. El fermento láctico (*Streptococcus thermophilus* y *Lactobacillus delbruekii* subespecie *bulgaricus*) para la producción del yogurt y los AE de manzanilla y canela se obtuvieron de forma comercial.

DETERMINACIONES FÍSICOQUÍMICAS EN LECHE Y YOGURT

Se determinó el porcentaje de grasa por método Gerber (AOAC, 2000), el cual consiste en liberar la grasa contenida en los glóbulos de caseína mediante su desnaturalización con ácido sulfúrico para después hacer una separación mediante centrifugación (McSweeney *et al.*, 2020). Se determinó el porcentaje de proteína por método Kjeldahl, éste se basa en la determinación de nitrógeno presente en los grupos amino de los aminoácidos mediante la digestión de la muestra en un medio ácido y, posteriormente, realizar una destilación del amonio obtenido y finalmente su titulación con HCl 0.1 N (Lynch & Barbano, 1999). El porcentaje de sólidos totales (ST) y humedad (H) se determinó de manera gravimétrica con una termobalanza (ADAM, modelo AMB110), y los valores se obtuvieron con las ecuaciones de ST (ecuación 1), H (ecuación 2); y las cenizas se cuantificaron por oxidación en seco con una mufla (ecuación 3).

Ecuación 1

$$\%ST = \frac{(PC-PF)}{(PM-PF)} \times 100$$

Ecuación 2

$$\%Humedad = \frac{(PM-PC)}{(PM-PF)} \times 100$$

PF = Peso del papel filtro
PC = Peso final de la muestra
PM = Peso de la muestra

Ecuación 3

$$\%Cenizas = \frac{(m1-m2)}{(m1-m0)} \times 100$$

m0 = Peso constante del crisol
m1 = Peso del crisol con la muestra
m2 = Peso final de los crisoles

El pH se determinó con un potenciómetro previamente calibrado, y el porcentaje de acidez se determinó mediante una titulación alcalino métrica utilizando NaOH 0.1 N, y como indicador fenolftaleína y también de manera potenciométrica a pH de 8.3.

PREPARACIÓN, PASTEURIZACIÓN Y FERMENTACIÓN DEL MIX

Para la elaboración del yogurt se utilizó leche estandarizada (grasa 3.5 % y sólidos totales 13.5 %), y se pasteurizó a 85° C durante 30 minutos con agitación constante (Jiménez-Redondo *et al.*, 2022). Posteriormente se enfrió a 43 ± 2° C, se inoculó con fermento láctico a 0.029 g/L y se agregaron aceites esenciales de canela 0.1 y 0.05 % (C 0.1 y C 0.05), manzanilla 0.1 y 0.05 % (M 0.1 y M 0.05) y una mezcla de canela: manzanilla (1:1) en concentraciones 0.1 y 0.05 % (CM 0.1 y CM 0.05). Se incubó a 42 ± 2° C durante 7 horas y se monitorearon los valores de acidez (pH < 4.8). Posteriormente se enfrió en baño de hielo (<15° C) con agitación constante para detener la fermentación. Por último, se envasó el yogurt y se llevó a refrigeración a 4° C.

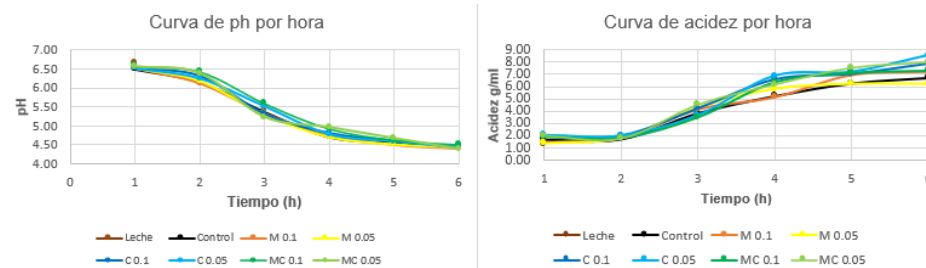
DETERMINACIÓN DE VISCOSIDAD, SINÉRESIS Y GRUMOS EN YOGURT

La formación de grumos y sinéresis se determinó de manera visual; en el caso de los grumos se tomó 1 ml de muestra, se colocó sobre una superficie plana y se tomó evidencia fotográfica. Para la determinación de sinéresis se observó la separación de suero desprendido por el propio yogurt en almacenamiento. Por último, se midió la viscosidad del yogurt con un viscosímetro (Thermo Electron, HAAKE Viscotester 2 plus) haciendo uso de la aguja N. 3.

RESULTADOS

Durante la fermentación del yogurt, la cual duró 7 horas, el pH pasó de 6.55 en la leche a alrededor de 4.50 para todas las muestras de yogurt (Figura 1 A). Por su parte, los valores de acidez se incrementaron de 1.26 a 8.55 g/100 ml de ácido láctico (Figura 1 B). El aumento de acidez en el yogurt por la producción de ácido láctico ocasiona la coagulación de la caseína cambiando la textura y el sabor del producto (Tojo-Sierra, 2006). Lo anterior deja claro que la fermentación del yogurt no se ve afectada por concentraciones de 0.05 y 0.1 % de los AE de canela y manzanilla.

Figura 1. Valores de A) pH y B) acidez titulable durante la fermentación de yogurt adicionado con aceites esenciales de canela y manzanilla



En cuanto al conteo de bacterias ácido-lácticas presentes en el yogurt, debe contener como mínimo 10^7 UFC/g de la suma de *Streptococcus thermophilus* y *Lactobacillus delbrueckii* subespecie bulgaricus viables, conforme al método de prueba de bacterias que fermentan los productos, del numeral 8 de la NMX-703-COFOCALEC-2004.

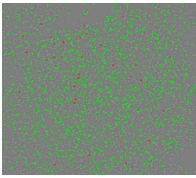
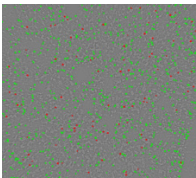
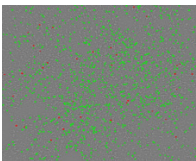
Por otro lado, estudios previos mencionan que la fuerte actividad antifúngica del aceite esencial de canela en un modelo de yogurt tenía una fuerte actividad antimicrobiana, por lo que provocó una fermentación incompleta de la leche (Osimani *et al.*, 2022b). Lo anterior debido a la inhibición del crecimiento de levaduras en concentraciones relativamente bajas, entre 0,31 y 1,25 μ l/ml. De ahí la importancia de evaluar parámetros de fermentación como el crecimiento de los microorganismos presentes en la acidificación de la leche para formar yogurt.

En consecuencia, los datos especificados en la tabla 1 indican el contenido y viabilidad de bacterias ácido-lácticas (BAL) en las muestras que contienen AE de canela y manzanilla. Lo cual puede deberse a que las concentraciones utilizadas permitieron un desarrollo adecuado de BAL, aunque algunos estudios han demostrado que el aceite esencial de canela es más eficaz contra microorganismos como las levaduras.

Tabla 1. Conteo de células totales y viabilidad de bacterias ácido lácticas (BAL).

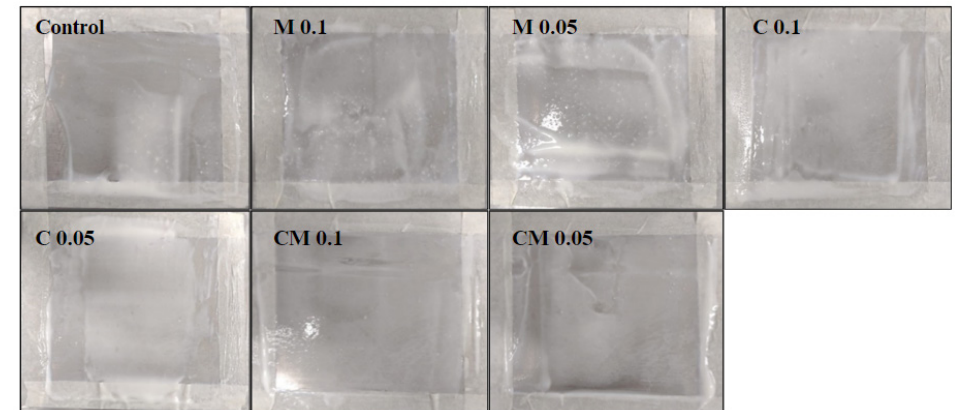
Muestra	Imagen	Total de BAL	Viabilidad
Control		$1.30e+7 \pm 4.11e+6$ cells/ml	95.3 ± 5.73 %
M 0.1		$1.49e+7 \pm 7.45e+5$ cells/ml	95.9 ± 1.55 %
M 0.05		$1.45e+7 \pm 1.60e+6$ cells/ml	96.9 ± 1.88 %
C 0.1		$1.42e+7 \pm 1.34e+6$ cells/ml	97.5 ± 2.68 %

Continúa sg. pg.

C 0.05		$1.56e+7 \pm 9.60e+5$ cells/ml	96.4 ± 1.20 %
MC 0.1		$1.19e+7 \pm 3.98e+6$ cells/ml	91.8 ± 4.31 %
MC 0.05		$1.35e+7 \pm 1.97e+6$ cells/ml	97.3 ± 0.56 %

El yogurt obtenido durante la fermentación fue una mezcla homogénea, sin embargo, las muestras control y manzanilla (M 0.1 % y M 0.05 %) mostraron formación de grumos durante el envasado, por su parte las muestras de canela (C 0.1 % y C 0.05 %) así como las mezclas que contenían canela y manzanilla (CM 0.01 % y CM 0.05 %) no tuvieron presencia de grumos (Figura 2). Debido a que solo los yogures de las mezclas (CM 0.01 % y CM 0.05 %) y canela (C 0.1 % y C 0.05 %) estuvieron libres de grumos, por lo que se puede sugerir que el AE de canela ayudó a estabilizar la mezcla evitando la formación de grumos.

Figura 2. Presencia de grumos en yogurt adicionado con aceites esenciales de canela y manzanilla



En la figura 3 se observa que al día siguiente del envasado (D+1), se presentó sinéresis en las muestras con grumos, lo cual confirma que el AE de canela ayuda a estabilizar el yogurt. Con el paso de los días fue más notoria la separación de suero en dichas muestras (D+28), esto se debe a que el período de almacenamiento afecta significativamente la tasa de sinéresis en las muestras de yogurt ($p < 0.05$) basado en el efecto de contracción resultante del bajo pH sobre las partículas de caseína y, por lo tanto la adición del AE de canela aumenta la resistencia del yogurt a la sinéresis (Yangilar & Yildiz, 2018).

En un estudio realizado por Suliman *et al.* (2019), evaluaron el potencial del polvo de la canela (CP) como agente antioxidante y antimicrobiano en yogurt. Utilizaron diferentes concentraciones de CP (0 %, 0.5 % y 1 %) las cuales mostraron un efecto significativo en el pH, especialmente en concentraciones altas, lo que indica que la concentración de CP influye para estabilizar el pH yogurt.

Las NOM-243-SSA1-2010 y NOM-092-SSA1-1994 establecen los límites máximos de contenido microbiano para leche y derivados lácteos, incluyendo los coliformes totales (≤ 20 UFC/g o ml), aerobios totales (≤ 300 UFC/g o ml), mohos y levaduras (≤ 150 UFC/g o ml) en el yogurt. Los resultados de los análisis microbiológicos realizados en este estudio estuvieron dentro de los valores establecidos para todas las muestras

durante los 28 días de vida de anaquel, lo que se podría atribuir a una pasteurización correcta durante 30 min a 85° C y aunado a ello, se realizó un análisis HACCP para tener condiciones de inocuidad durante el envasado. Para observar el crecimiento de microorganismos y descomposición del yogurt se dejó aún en almacenamiento hasta observar cambios visibles de descomposición y la aparición de mohos y levaduras. En la figura 2 (C y D), se observa la aparición de mohos en el D+60 en las muestras control. Las muestras con AE de canela y manzanilla a los 60 días continuaban estables y sin descomposición evidente, por lo que, se puede pensar que la adición de AE canela y manzanilla a las concentraciones de 0.1 y 0.05 % inhiben el crecimiento de microorganismos, prolongando la vida de anaquel del yogurt.

Figura 3. Liberación de suero (sinéresis) en las muestras de yogurt al día A) D+1 y B) D+28; y seguimiento microbiológico del yogurt C) D+60 y D) hongos en control D+60



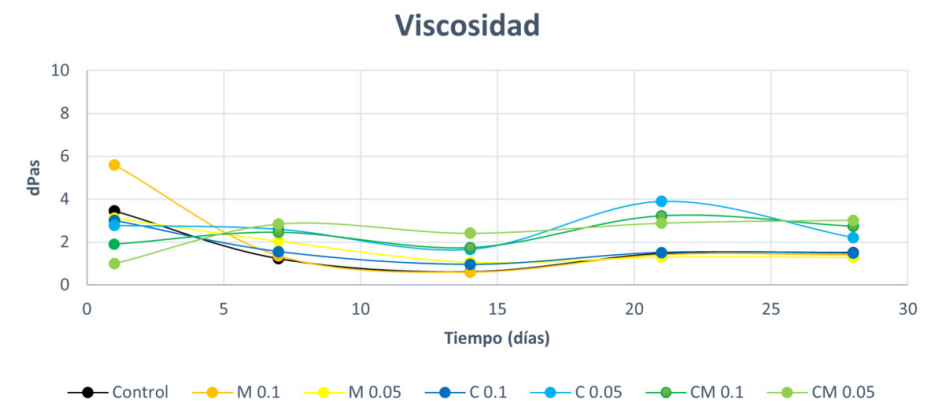
Los resultados de las pruebas fisicoquímicas al D+1 (Tabla 2) fueron similares para todas las muestras; se obtuvieron valores muy parecidos en todas las muestras, los cuales se encuentran dentro de los parámetros de la NOM-181-SCFI-2010, la cual establece las especificaciones microbiológicas, fisicoquímicas y nutrimentales que debe de cumplir el yogurt.

Tabla 2. Pruebas fisicoquímicas en yogures adicionados con AE al día 1 (D +1) y 35 (D +35) después del envasado

	D +1	D +35
Grasa	3.5 ± 0.1 %	3.61 ± 0.19 %
Humedad	87.5 ± 0.2 %	87.53 ± 0.2 %
Sólidos totales	12.5 ± 0.2 %	12.48 ± 0.2 %
Sólidos no grasos	8.3 ± 0.1 %	8.87 ± 0.3 %
Proteína	3.4 ± 0.1 %	3.4 ± 0.1 %
Cenizas	0.9 ± 0.1 %	0.9 ± 0.02 %

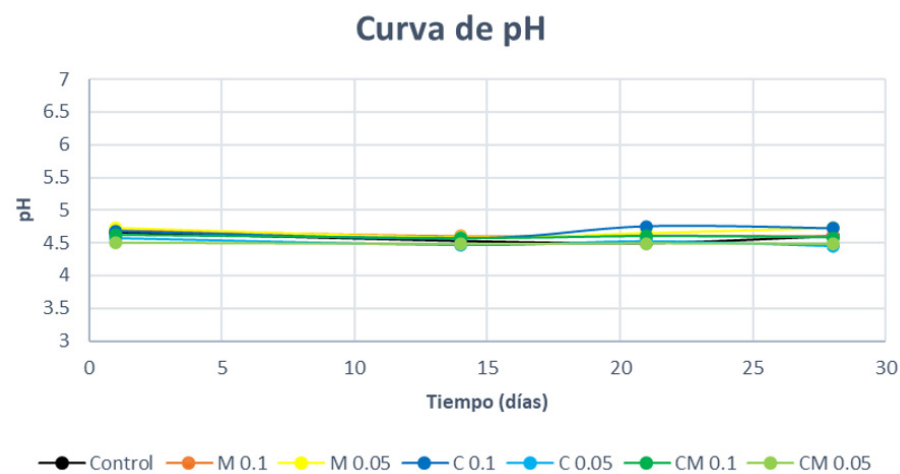
En cuanto a la viscosidad, esta se evaluó al D+1, D+7, D+14, D+21 y D+28 (Figura 4). Se detectaron los cambios más notorios en los yogures adicionados con AE de manzanilla (0.1 y 0.05), canela (C 0.1) y el control; en el D+1 tuvieron mayor viscosidad en comparación con las otras muestras y al finalizar en el D+28 su viscosidad disminuyó. Esta disminución de viscosidad se puede relacionar con la sinéresis ya que fueron las muestras que mostraron mayor separación de agua.

Figura 4. Viscosidad de yogurt adicionado con aceites esenciales de canela y manzanilla durante 28 días



El pH se evaluó durante el periodo de 28 días (específicamente D+1, D+7, D+14, D+21 y D+28) (Figura 5). Se puede observar que los valores de pH se mantuvieron constantes durante los 28 días de vida de anaquel evaluados. Esto es consistente con trabajos previos realizados por Ghalem & Zouaoui (2013), que observaron que aceites de *Lavandula* y *Chamaemelum* ayudaban a mantener los valores de pH constantes a diferencia de los que no contenían AE.

Figura 5. pH de yogurt adicionado con aceites esenciales de canela y manzanilla durante 28 días



CONCLUSIONES

Los yogures adicionados con AE de canela, manzanilla y la mezcla de ambos en concentraciones entre 0.05 y 0.1 % permiten el crecimiento adecuado de bacterias ácido-lácticas y demostraron tener efecto antimicrobiano sobre los microorganismos que degradan el yogurt. Por su parte el aceite esencial de canela tuvo efecto positivo sobre las propiedades del yogurt como sinéresis, formación de grumos y viscosidad, lo cual genera un valor agregado al producto final. Por último, las concentraciones utilizadas en el estudio no afectan los parámetros fisicoquímicos del yogurt; sin embargo, sería necesario evaluar la aceptabilidad sensorial de las muestras para que el producto pueda terminar en el mercado de consumidores.

REFERENCIAS

- AOAC (2000) Official Methods of Analysis. *The Association of Official Analytical Chemists* (17).
- Caleja, C., Barros, L., Antonio, A. L., Ciric, A., Barreira, J. C., Sokovic, M., Oliveira, M., Santos-Buelga, C. & Ferreira, I. C. (2015). Development of a functional dairy food: Exploring bioactive and preservation effects of chamomile (*Matricaria recutita* L.). *Journal of functional foods*, 16, 114-124.
- El Mihaoui, A., Esteves da Silva, J. C., Charfi, S., Candela Castillo, M. E., Lamarti, A. y Arnao, M. B. (2022). Chamomile (*Matricaria chamomilla* L.). A review of ethnomedicinal use, phytochemistry and pharmacological uses. *Life*, 12(4), 479.
- FAO. (2017). *Pérdida y desperdicio de Alimentos en América Latina y el Caribe: Alianzas e Institucionalidad para construir mejores políticas*. Food and Agriculture Organization. [Archivo PDF]. <http://www.fao.org/3/a-i7248s.pdf>
- Friedman, M. (2017). Chemistry, antimicrobial mechanisms, and antibiotic activities of cinnamaldehyde against pathogenic bacteria in animal feeds and human foods. *Journal of agricultural and food chemistry*, 65(48), 10406-10423.
- Ghalem, B. R. y Zouaoui, B. (2013). Evaluation of the quality of steamed yogurt treated by *Lavandula* and *Chamaemelum* species essential oils. *Journal of Medicinal Plants Research*, 7(42), 3129-34.
- Jiménez-Redondo, N., Vargas, A. E., Teruel-Andreu, C., Lipan, L., Muelas, R., Hernández-García, F., Sendra, E. y Cano-Lamadrid, M. (2022). Evaluation of cinnammon (*Cinnamomum cassia* and *Cinnamomum verum*) enriched yoghurt during refrigerated storage. *LWT-Food Science and Technology*, 159, 113240.
- Lynch, J. M. y Barbano, D. M. (1999). Kjeldahl nitrogen analysis as a reference method for protein determination in dairy products. *Journal of AOAC international*, 82(6), 1389-1398.
- Maurya, A., Prasad, J., Das, S. y Dwivedy, A. K. (2021). Essential oils and their application in food safety. *Frontiers in Sustainable Food Systems*, 5, 653420.
- McSweeney, P. L., Fox, P. F. y O'Mahony, J. A. (2020). *Advanced dairy chemistry 4* (2).
- Mortazavi, N. y Aliakbarlu, J. (2019). Antibacterial effects of ultrasound, cinnamon essential oil, and their combination against *Listeria monocytogenes* and *Salmonella Typhimurium* in milk. *Journal of Food Science*, 84(12), 3700-3706.
- Nielsen, L., Rolighed, M., Buehler, A., Knöchel, S., Wiedmann, M. y Marvig, C. (2021). Development of predictive models evaluating the spoilage-delaying effect of a bioprotective culture on different yeast species in yogurt. *Journal of Dairy Science*, 104(9), 9570-9582.
- Osimani, A., Garofalo, C., Harasym, J. y Aquilanti, L. (2022b). Use of essential oils against foodborne spoilage yeasts: Advantages and drawbacks. *Current Opinion in Food Science*, 45, 100821.

- Pandey, A. K., Kumar, P., Singh, P., Tripathi, N. N. y Bajpai, V. K. (2017). Essential oils: Sources of antimicrobials and food preservatives. *Frontiers in microbiology*, 7, 2161.
- Pathak, R. y Sharma, H. (2021). A review on medicinal uses of *Cinnamomum verum* (Cinnamon). *Journal of Drug Delivery and Therapeutics*, 11(6), 161-166.
- Ríos, J. L. (2016). Essential oils: What they are and how the terms are used and defined. En V. R. Preedy (Ed.), *Essential oils in food preservation, flavor and safety* (pp. 3-10). Academic Press.
- Santo, A. P. D. E., Perego, P., Converti, A. y De Oliveira, M. N. (2012). Influence of milk type and addition of passion fruit peel powder on fermentation kinetics, texture profile and bacterial viability in probiotic yoghurts. *LWT*, 47(2), 393-399.
- Sáyago-Ayerdi, S. G., Arranz, S. Serrano, J. y Goñi, I. (2007). Dietary fiber content and associated antioxidant compounds in roselle flower (*Hibiscus sabdariffa* L.) beverage. *J. of Agricultural and Food Chemistry*, 55(19), 7886-7890.
- Secretaría de Gobernación. (12 de diciembre de 1995). NORMA Oficial Mexicana NOM-092-SSA1-1994, Bienes y servicios. Método para la cuenta de bacterias aerobias en placa. https://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=4886029&fecha=12/12/1995
- Suliman, A., Ahmed, K., Mohamed, B. & Babiker, E. (2019). Potencial de la canela (*Cinnamomum Cassia*) como agente antioxidante y antimicrobiano en el yogu sudanés (Zabadi). *Journal and Veterinary Sciences*, 12(2), 555833.
- Tojo-Siera, R. (2006). *Productos lácteos fermentados*. Anales de Pediatría. <https://www.analesdepediatria.org/es-productos-lacteos-fermentados-articulo-13092366>
- Valdivieso-Ugarte, M., Gomez-Llorente, C., Plaza-Díaz, J. y Gil, Á. (2019). Antimicrobial, Antioxidant, and Immunomodulatory Properties of Essential Oils: A Systematic Review. *Nutrients*, 11(11), 2786.
- Xing, Y., Li, X., Xu, Q., Yun, J. y Lu, Y. (2010). Antifungal activities of cinnamon oil against *Rhizopus nigricans*, *Aspergillus flavus* and *Penicillium expansum* in vitro and in vivo fruit test. *International journal of food science & technology*, 45(9), 1837-1842.
- Yangilar, F., y Yildiz, P. O. (2018). Effects of using combined essential oils on quality parameters of bio-yogurt. *Journal of Food Processing and Preservation*, 42(1), 13332.

Procesos contaminantes

URIEL RAMOS ROCHA

uriel.ramos6614@alumnos.udg.mx

JAZMÍN SANDOVAL REYES

jazmin.sandoval4990@alumnos.udg.mx

BERTHA ALICIA ARCE CHÁVEZ

bertha.arce@academicos.udg.mx

RESUMEN

Es sabido que las metodologías productivas dominantes articulan la extracción intensiva/extensiva de recursos naturales y su transformación en bienes de consumo. La conceptualización de “desarrollo” se banaliza cuando suelos tradicionalmente agrícolas migran a la actividad industrial inoculando células industriales en sitios vulnerables ambientalmente. Tal vez en una interpretación del *nearshoring* a nivel microgeográfico se ha perdido el equilibrio entre la calidad ambiental y la racionalidad productiva.

Por su cuenta, las políticas públicas son esquemáticas y conducen a una organización territorial que aspira a lo ideal sin considerar medidas preventivas o, en su caso, correctivas en el aprovechamiento del Sistema Suelo en sus diferentes usos (urbanización, agricultura o conservación).

En ese escenario de incertidumbre se desenvuelve Lagos de Moreno (Jalisco), donde aparentemente se controlan los procesos demográficos, urbanizantes y receptores de industrias más con acciones públicas sectoriales e, incluso, disociadas que soslayan el sentido intrusivo y extractivo, compeliendo al agotamiento y contaminación de una de las fuentes de recursos naturales más productiva: el suelo.

Así, este estudio abona a una evaluación del impacto ambiental de este “orden industrializante” en suelos agrícolas aledaños con base en la caracterización nutrimental y la probable presencia de elementos tóxicos en un suelo prototípico.

PALABRAS CLAVE

Contaminación del suelo (soil contamination), Lagos de Moreno, Análisis de suelos (soil analysis), Agentes tóxicos (toxic agents), Actividades industriales (industrial activities)

INTRODUCCIÓN

En México existe una grave crisis causada por la circulación abundante de diversos agentes tóxicos. Estos se han acumulado y mezclado a lo largo de décadas en el aire, el agua superficial y subterránea, así como en los suelos y los organismos vivos. La situación es particularmente crítica en las regiones donde, como resultado de vertidos o emisiones de sustancias tóxicas, accidentes y explosiones, la exposición a agentes tóxicos es cotidiana. Aunque, a la fecha, no se haya logrado comprender plenamente el modo en que esta situación ha detonado o agravado el deterioro masivo de la salud humana y biológica que impera en las regiones contaminadas, el principio de precaución obliga a la comunidad científica nacional a considerar este problema como un asunto prioritario de emergencia ambiental y sanitaria. (CONAHCIT, 2023)

El término “contaminación del suelo” se refiere a la presencia en el suelo de un químico o una sustancia fuera de sitio y/o presente en una concentración más alta de lo normal que tiene efectos adversos sobre cualquier organismo al que no está destinado (FAO y GTIS, 2015).

La transformación en los suelos por la actividad biológica de los componentes orgánicos en diversos metabolitos, hacen que los estudios de suelos para identificar a los contaminantes sean complejos y costosos. Los efectos de la contaminación del suelo también dependen de las propiedades de éste, ya que controlan la movilidad, biodisponibilidad y tiempo de residencia de los contaminantes (FAO y GTIS, 2015).

Las principales fuentes de contaminación del suelo son antropogénicas, lo que resulta en la acumulación de contaminantes del suelo que pueden alcanzar niveles preocupantes (Cachada, Rocha- Santos y Duarte, 2018).

Existen diferentes tipos de contaminación de suelo, como, por ejemplo:

CONTAMINACIÓN ENDÓGENA O NATURAL

Se trata del tipo de contaminación del suelo que se da de forma natural, ocurre cuando hay fenómenos naturales que arrastran y filtran en la tierra

elementos químicos naturales, pero en concentraciones muy elevadas para que ese suelo siga saludable y fértil (Irene Juste, 2021).

CONTAMINACIÓN ANTRÓPICA, EXÓGENA O POR EL SER HUMANO

Es el tipo de contaminación que producimos los humanos, es decir, se da cuando a través de las actividades humanas introducimos agentes contaminantes en la naturaleza. Se da en el caso de la contaminación vehicular o producida por los coches, por fábricas e industrias, el uso de aire acondicionado y calefacción, la explotación indebida de los recursos naturales, etcétera. (Irene Juste, 2021)

CONTAMINACIÓN POR SUSTANCIAS QUÍMICAS

Forma parte de la contaminación antrópica, pues se presenta cuando hay productos químicos sintéticos en el medio ambiente. Es el caso de los pesticidas y plaguicidas, los hidrocarburos y los solventes. Estas sustancias afectan negativamente todo el medio ambiente, por lo que contaminan el suelo, pero también el aire y el agua y favorecen el desequilibrio ecológico del área (Juste, 2021)

CONTAMINACIÓN DEL SUELO POR INFILTRACIÓN

El proceso natural de infiltración del agua superficial en la tierra puede ser perjudicial en algunas áreas debido al exceso de agua que afloja demasiado el suelo. Además, cuando el agua está contaminada, toda la contaminación se deposita en el suelo, agravando el problema (Juste, 2021).

CONTAMINACIÓN DE LA TIERRA POR RESIDUOS

La acumulación de nuestros residuos, ya sean del hogar o de grandes industrias, en un lugar concreto genera un nivel elevado de contaminación directa del suelo, pues se da el proceso de degradación de los residuos por la exposición al ambiente y su lixiviación. Es el caso de los vertederos de basuras (Juste, 2021)

CONTAMINACIÓN POR EDIFICACIONES ABANDONADAS

El abandono de edificios e instalaciones que eran de alguna industria o incluso poblaciones, también produce contaminación ambiental, sobre todo en el suelo. Los terrenos baldíos quedan inútiles para los animales

y plantas durante un tiempo largo y en este periodo, además, no dejan de contaminar a través de los elementos, entre los cuales incluso pueden encontrarse residuos peligrosos (Juste, 2021).

CARACTERIZACIÓN GEOREFERENCIADA DE SUELO

Lagos de Moreno, Jalisco es un territorio que evolucionó económicamente de las actividades agropecuarias hacia las comerciales e industriales. Debido a este fenómeno de transición sin planeación, las plantas industriales se instalaron en sitios cercanos a sus proveedores, es decir, en los alrededores de zonas ganaderas y agrícolas; por ello surge la sospecha fundada de que debido a las potenciales emisiones, estos suelos agropecuarios pueden estar siendo vulnerados por distintos componentes químicos, los cuales influyen en el grado de fertilidad del sistema. Así, se recolectaron muestras representativas de suelo con uso mixto: de zonas aledañas a industrias insertadas en entornos agrícolas y pecuarios.

La conjetura de partida fue que dichas muestras evidenciarían el tipo de contaminación (exógena) con fundamento en la certidumbre de que las zonas están intervenidas por múltiples actividades humanas.

Así, por medio de este trabajo de caracterización experimental se pueden identificar los suelos que se encuentran más contaminados y tomar acción en ellos para que en algún futuro puedan llegar a ser fértiles de acuerdo con la norma oficial mexicana NOM-021-RECNAT-2000, la cual establece las especificaciones de fertilidad, salinidad y clasificación de suelos, estudios, muestreo y análisis. Contribuyendo esto a los lugares de donde fueron extraídas las muestras al cumplir con las normativas.

MATERIALES Y MÉTODOS

1. Se recolectaron las muestras con base en los protocolos de la Norma Oficial Mexicana NOM-021 SEMARNAT-2000.
2. Las muestras recolectadas se caracterizan con los dispositivos de medición de un mini laboratorio kit portátil (LaMotte Smart 3 Soil, Modelo SCL-12, véase Ilustración) diseñado para el monitoreo de la calidad del suelo mediante el procedimiento basado en el método de extracción multielemental (P, Ca, Mg, Na y K) con base en disoluciones extractantes “universales” válidas para macronutrientes y micronutrientes (Cu, Zn y Mn) y utilizable, por lo tanto, en una

amplia diversidad de suelos; además por la condición de portabilidad de los dispositivos digitales medidores (colorímetro, medidor de Ph y TDS 5) la medición de parámetros básicos se ejecuta de forma rápida, precisa y económica.

Figura 1. Laboratorio portátil para análisis de fertilidad de suelos



3. Obteniendo las muestras de suelo (en el caso de este estudio fueron 8), entonces se hicieron los procedimientos indicados por el manual del usuario, a saber:

- pH
- Requisitos de Lima
- Amoniaco – Nitrógeno
- Sales solubles
- Calcio y magnesio
- Cloruro
- Fosfato
- Cobre
- Hierro
- Manganeso
- Nitrógeno de Nitrato
- Nitrógeno de Nitrito
- Potasio
- Azufre
- Zinc

Que se recibieron en envases referenciados con rótulos para la identificación de los sitios de recolección tal como se muestra en las subsecuentes Imágenes:

Figura 2. Muestra #1 Tierra extraída del Río de lagos detrás del CPW Nestlé

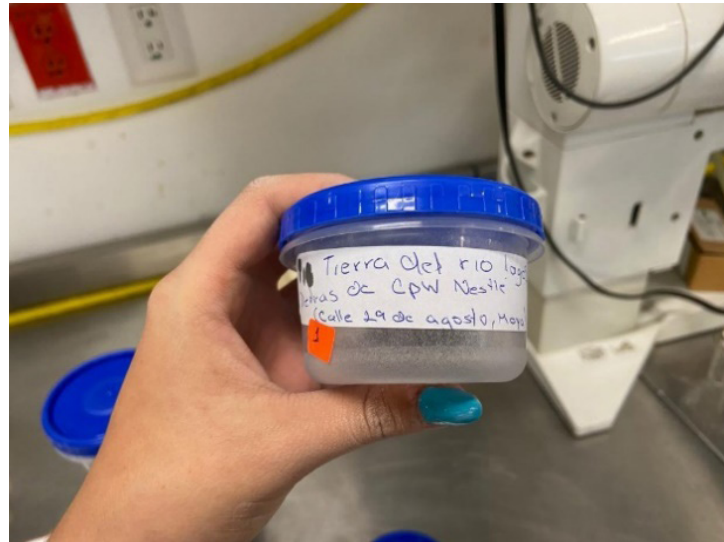


Figura 3. Muestra #2 Tierra extraída de la entrada del taller mecánico "los ceros"

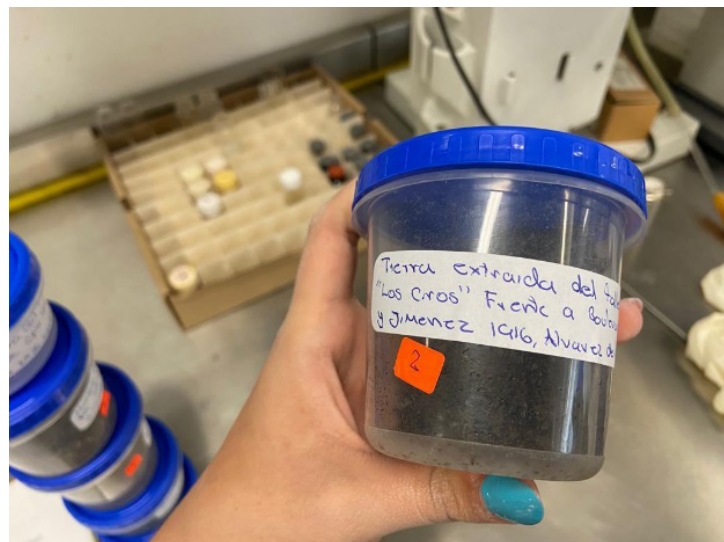


Figura 4. Muestra #3. Tierra extraída del vivero "Francisco"

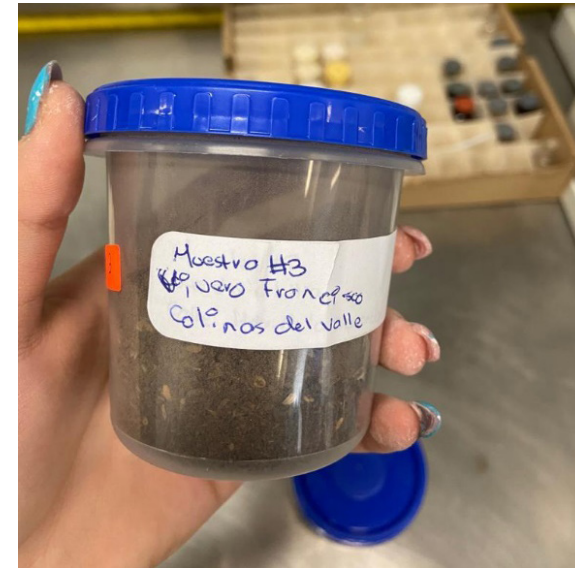


Figura 5. Muestra #4. Tierra extraída de "Vulcanizadora"

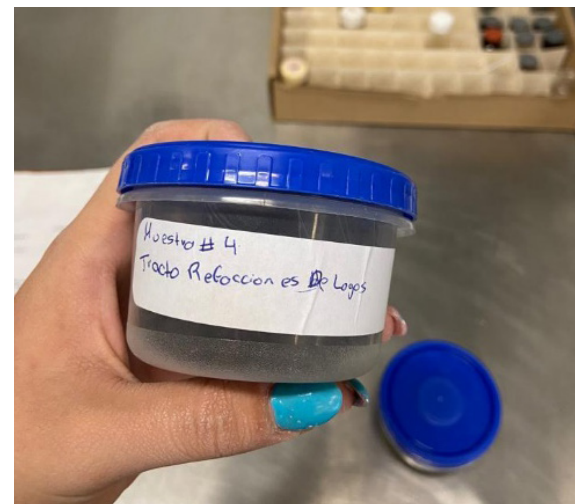


Figura 6. Muestra #5. Tierra extraída de la refaccionaría “Lagos”



Figura 8. Muestra #7. Tierra de agro tienda Comfosa

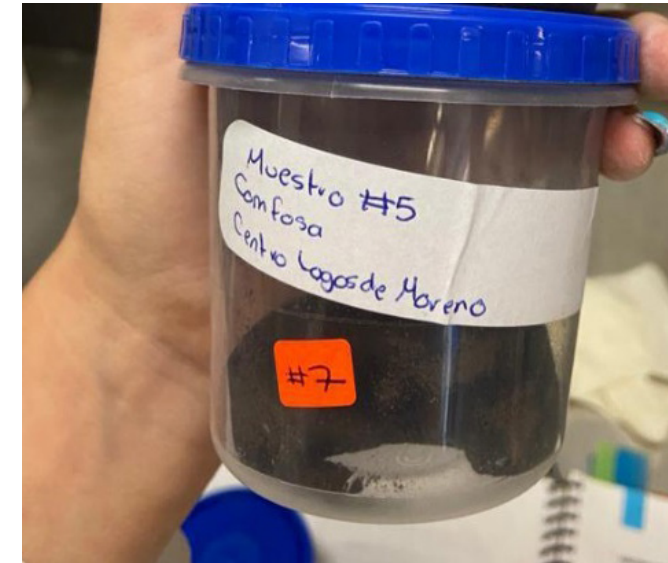


Figura 7. Muestra #6. Tierra restos de carpintería “Cuitláhuac”

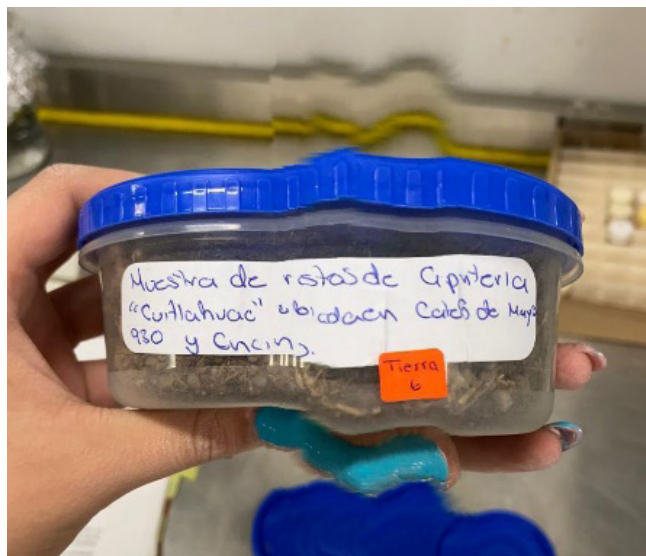


Figura 9. Muestra #8. Tierra extraída de Nestlé



El objetivo es conocer las concentraciones de los diferentes macronutrientes y micronutrientes en cada una de las muestras de suelo analizadas, pues se recolectaron en sitios diversos. Con los resultados obtenidos y el análisis de sus valores se realizan conjeturas que servirán como premisas certeras sobre el estado del suelo: si es o no fértil para orientarlo a actividades agrícolas pertinentes o tomar decisiones para su remediación

RESULTADOS

Para una mejor comprensión del procedimiento, los resultados se han integrado en las siguientes tablas y se complementaron con gráficas que evidencian de manera más tajante el nivel de concentración de los elementos estudiados en cada muestra.

Tabla 1. Denominación y descripción de las muestras de suelo

Número de muestra	Descripción de lugar de recolección
Muestra 1	Tierra del rio Lagos (detrás de CPW Nestlé, Calle 29 de agosto, Moya)
Muestra 2	Tierra del taller mecánico “Los ciros”(frente a bulevar Orozco y Jiménez #1916)
Muestra 3	Tierra extraída del Vivero Francisco (colinas del valle)
Muestra 4	Tierra de vulcanizadora (Lateral de bulevar francisco Orozco Jiménez, calle los olivos)
Muestra 5	Tierra extraída de Refacciones de Lagos
Muestra 6	Tierra restos de carpintería “Cuitláhuac” (calle 5 de mayo y encino)
Muestra 7	Tierra de agro tienda Comfosa Centro Lagos de Moreno
Muestra 8	Tierra extraída de Nestlé

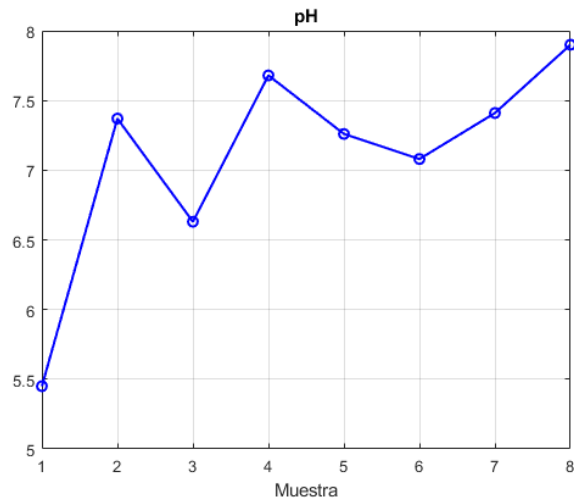
Tabla 2. Resultados obtenidos en cuanto a concentración de elementos y propiedades en cada una de las muestras analizadas

Parámetros / Muestras	Muestra 1	Muestra 2	Muestra 3	Muestra 4	Muestra 5	Muestra 6	Muestra 7	Muestra 8
PH	5.45	7.37	6.63	7.68	7.26	7.08	7.41	7.90
Requisitos de Lima	6.33	6.12	6.71	7.12	7.21	7.25	7.16	7.19
Amoniaco – Nitrogeno	88 lb/ acre Alta	112 lb/ acre Alta	2 lb/ acre Baja	63.5 lb/ acre Alta	52.5 lb/ acre Mediana	87.5 lb/ acre Alta	145 lb/ acre Alta	167.5 lb/ acre Alta
Calcio y Magnesio Titulacion A	20.64	21.2592	51.6	30.96	51.6	30.96	5.16	8.26
Calcio y Magnesio Titulacion B	56.19	61.92	30.96	41.28	41.25	30.96	51.6	92.88
Cloruro	4 gotas	4 gotas	26 gotas	9 gotas	12 gotas	24 gotas	8 gotas	15 gotas
Fosfato	71.36 lb/ acre Alta	17.28 lb/ acre Baja	33.056 lb/acre Alta	52.224 lb/acre Alta	87 lb/ acre Alta	118 lb/ acre Alta	1548 lb/ acre Muy alta	205 lb/ acre Alta
Cobre	1.4 ppm Baja	3.5 ppm Adecuada	0 ppm Nula	0 ppm Nula	7.95 ppm Adecuada	2.9 Adecuada	2.95 ppm Marginal	2.7 ppm Marginal
Hierro	17.35 ppm Alta	5.6 ppm	1.25 ppm Baja	5.5 ppm Mediana	10.8 ppm Alta	9.5 ppm Mediana	1.75 ppm Baja	3.15 ppm Mediana
Manganeso Alta gama	0 ppm Nula	5 ppm Baja	6 ppm Mediana	18.5 ppm Medio alto	1 ppm Baja	2.5 ppm Baja	28 ppm Alta	6.5 Mediana
Nitrato nitrógeno	180 lb/ acre Alta	91 lb/ acre Baja	92 lb/ acre Alta	83 lb/ acre Alta	24 lb/ acre Mediana	79 lb/ acre Alta	7 lb/ acre Baja	5 lb/ acre Baja
Nitrito – Nitrógeno	0 lb/ acre Nula	3 lb/acre Mediana	0 lb/ acre Nula	0.5 lb/ acre Baja	0.066 lb/ acre Baja	0.033 lb/ acre Baja	0.5 lb/ acre Baja	0.5 lb/ acre Baja

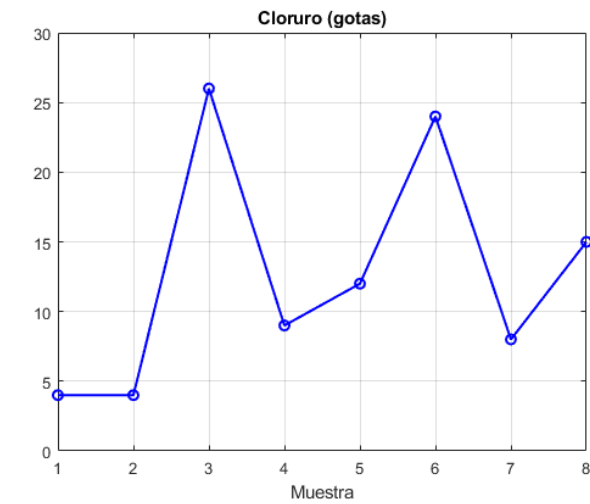
Continúa sg. pg.

Potasio	50 lb/acre Baja	75 lb/acre Baja	370 lb/acre Muy alta	460 lb/acre Muy alta	250 lb/acre Alta	15 lb/acre Muy baja	565 lb/acre Muy alta	255 lb/acre Alta
Azufre	85.8 ppm Alta	95.7 ppm Alta	56.1 ppm Alta	42.9 ppm Mediana	205 ppm Alta	36.5 ppm Mediana	23.1 ppm Media baja	21.45 ppm Media baja
Zinc	0 ppm Nula	0.05 ppm Baja	0.2 ppm Baja	0.85 ppm Marginal	0.65 ppm Marginal	1.25 ppm Adecuada	0.35 ppm Baja	7.2 ppm Adecuada

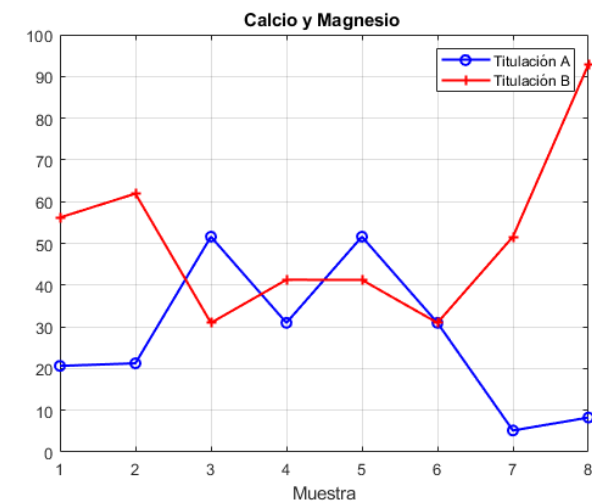
Gráfica 1. Se muestra la comparación de las muestras de PH resultando como la más alta la muestra 8 y la más baja la muestra 1



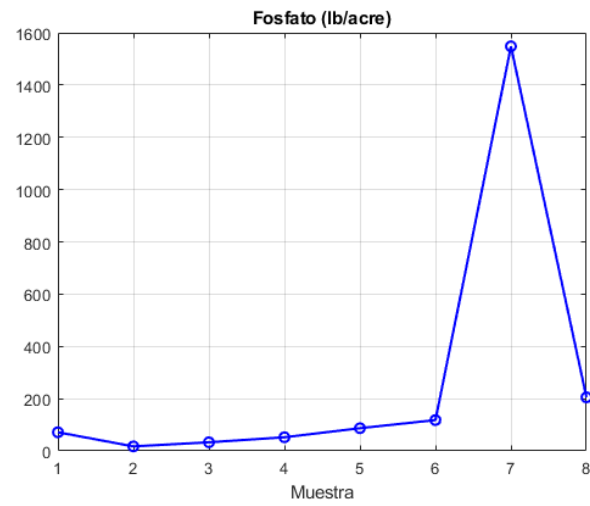
Gráfica 2. Se muestra la comparación de las muestras de Cloruro resultando como la más alta la muestra 3 y la más baja la muestra 1



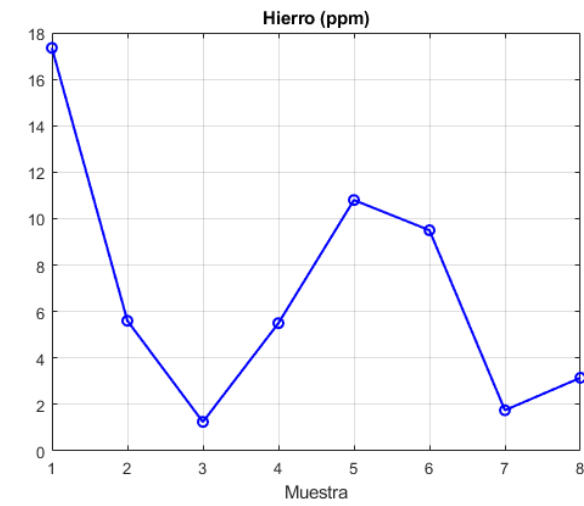
Gráfica 3. Se muestra la comparación de las muestras de Calcio y Magnesio con titulación A y B resultando como la más alta la muestra 8 y más baja la muestra 6 en la titulación B y la más alta la muestra 5 y la más baja en la muestra 4 en la titulación B



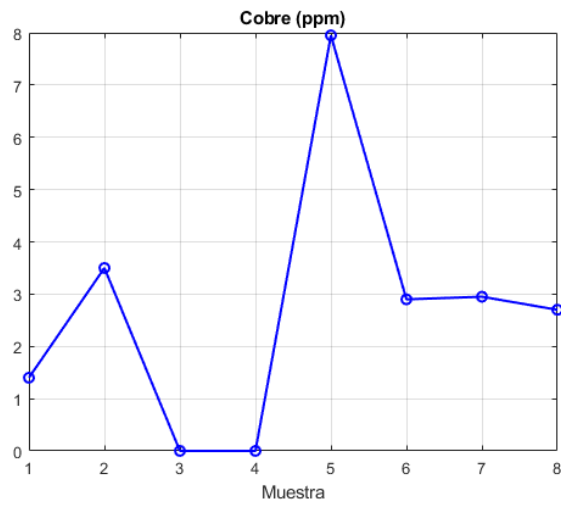
Gráfica 4. Se muestra la comparación de las muestras de Fosfato resultando como la más alta la muestra 7 y la más baja la muestra 2



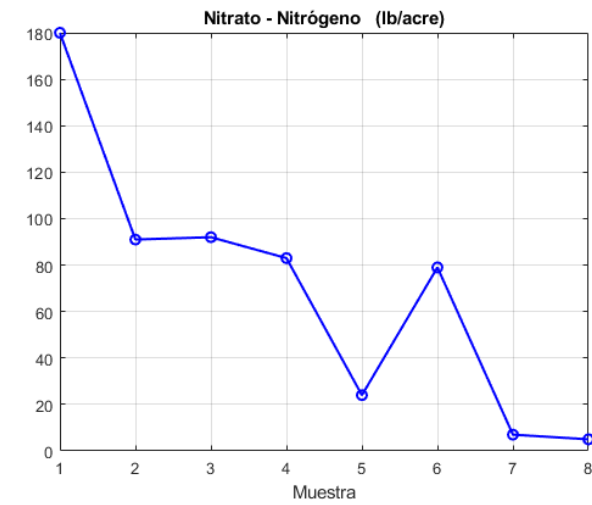
Gráfica 6. Se muestra la comparación de las muestras de Hierro resultando como la más alta la muestra 1 y la más baja la muestra 3



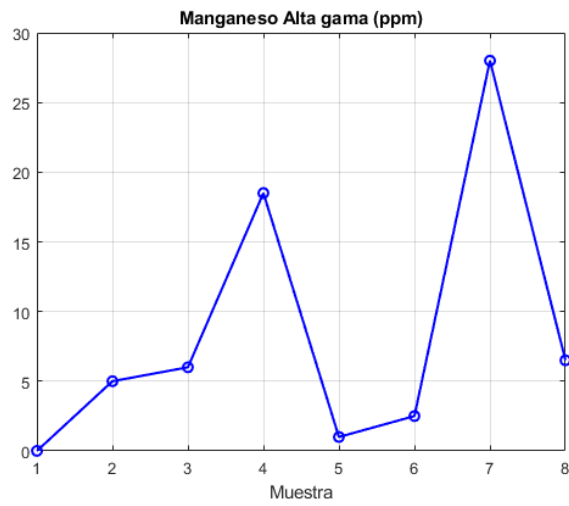
Gráfica 5. Se muestra la comparación de las muestras de Cobre resultando como la más alta la muestra 5 y la más baja la muestra 4



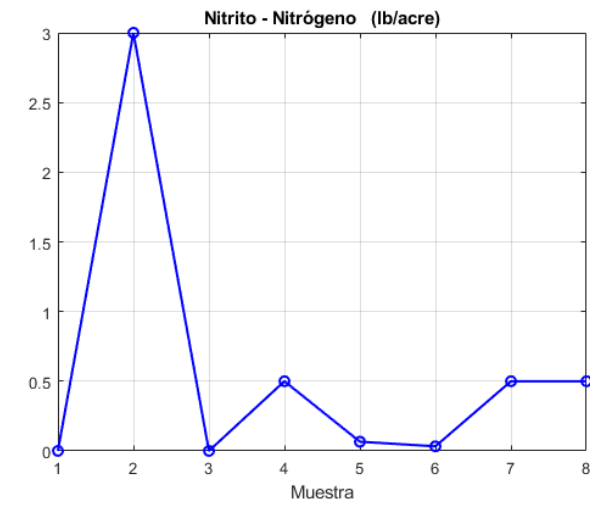
Gráfica 7. Se muestra la comparación de las muestras de Nitrato nitrógeno resultando como la más alta la muestra 1 y la más baja la muestra 8



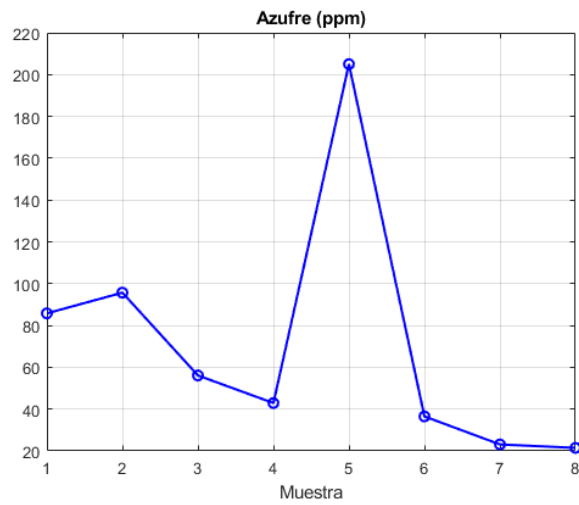
Gráfica 8. Se muestra la comparación de las muestras de Manganeso alta gama resultando como la más alta la muestra 7 y la más baja la muestra 1



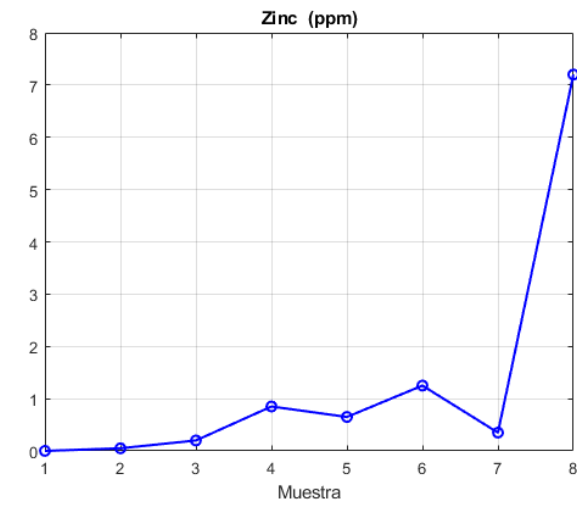
Gráfica 10. Se muestra la comparación de las muestras de Nitrito-nitrógeno resultando como la más alta la muestra 2 y la más baja la muestra 3



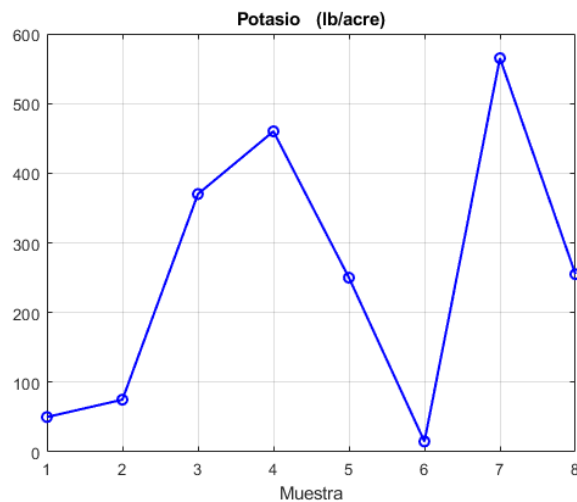
Gráfica 9. Se muestra la comparación de las muestras de Azufre resultando como la más alta la muestra 5 y la más baja la muestra 8



Gráfica 11. Se muestra la comparación de las muestras de Zinc resultando como la más alta la muestra 8 y la más baja la muestra 1



Gráfica 12. Se muestra la comparación de las muestras de Potasio resultando como la más alta la muestra 7 y la más baja la muestra 6



CONCLUSIONES

Como conclusión de los resultados mostrados anteriormente se puede asegurar que la mayoría de las muestras extraídas contienen los macronutrientes necesarios para que este suelo tenga un buen funcionamiento durante los siguientes años, sin embargo se encontró que los suelos que más contienen estos macroelementos (nitrógeno, fósforo, potasio, calcio y magnesio) son la muestra de suelo 7 y 8 debido a su alta concentración en comparación con las otras muestras.

Con respecto a los micronutrientes (zinc, manganeso, cloro y cobre), encontramos que las muestras que más los contenían eran la 6 y la 8, concluyendo que el suelo con mejores cualidades en este aspecto sería el relativo a la muestra 8, no obstante tienen una gran deficiencia con sus micronutrientes comenzando por el cobre y si no se toman las medidas necesarias, este y los suelos de las demás muestras podrían resultar infértiles en algún futuro.

El suelo es el sistema natural que da soporte a toda la funcionalidad vital en nuestro planeta e, irónicamente, es el más relegado en la toma de

decisiones en el momento de su uso, no sólo para modificarlo en razón de la comodidad del ser humano deforestando y urbanizando, sino descuidando el tema de la biodiversidad afectada por estos cambios o intervenciones.

Además, cabe mencionar la importancia de los nutrientes y el equilibrio del PH para el buen desarrollo del suelo y, a su vez, de la vegetación, ya que principalmente el PH indica el grado de acidez o alcalinidad en el suelo, lo que influye en el desarrollo del ecosistema, interviniendo así en la asimilación de los diferentes nutrientes. Afortunadamente, este no fue el caso en ninguna de las muestras, pero si alguna hubiera mostrado un nivel de pH bajo se tendría que usar cal para aumentarlo, aunque aumentar el pH del suelo puede llevar años. Por otro lado, existen cationes relativamente importantes que también influyen en la dinámica saludable de un suelo, como lo son el calcio, magnesio y potasio, los cuales se encuentran directamente involucrados en el crecimiento de las plantas, además del sodio e hidrógeno que permiten la disponibilidad de los nutrientes y humedad, permitiendo así su buen desarrollo y crecimiento.

Se sabe que la existencia y permanencia de los micro y macronutrientes en el suelo tienen potencial para mitigar el cambio climático y abonan a la reducción de emisiones gaseosas del efecto invernadero gracias a la descomposición microbiana, que ayuda a la retención/fijación del carbono en el suelo durante grandes periodos de tiempo.

Este estudio, aplicado a la ciudad de Lagos de Moreno, puede trasladarse a otras poblaciones o comunidades en las que las actividades económicas, industriales y sociales hayan formado una manera compleja y en la que los factores económicos y naturales se enfrenten ante las decisiones del Ordenamiento del Territorio.

Es importante, por último, resaltar que el cuidado y tratamiento de los suelos tiene que ver con el tipo de plantas que se desean sembrar ya que no todas necesitan de los mismos cuidados, nutrientes y minerales. Es una cuestión de uso sustentable y conservación del recurso.

Algunos aprendizajes obtenidos después de este trabajo serían:

- Equilibra los niveles de nutrientes, utilizando fertilizantes, ya sean orgánicos o inorgánicos.
- Mantener la materia orgánica del suelo: Aplicar composta y cultivos de cobertura.

- Manejar la salinidad del suelo y evitar la acumulación de sales.
- Aplicar prácticas adecuadas de labranza y riego para romper grandes agregados de suelo y mejorar la estructura de suelos compactados, más con la precaución de controlar la lixiviación de nutrientes esenciales en la absorción y esorrentía del agua.

REFERENCIAS

- Juste, I. (02 de septiembre de 2021). Contaminación del suelo: causas, consecuencias y soluciones. Ecología verde. <https://www.ecologiaverde.com/contaminacion-del-suelo-causas-consecuencias-y-soluciones-285.html>
- Manual Colorimetro SMART3 para suelos Traducido. (s.f.). [Archivo PDF] Scribd. <https://es.scribd.com/document/491859892/4-Manual-Colorimetro-SMART3-para-suelos-Traducido#>
- Rodríguez N., McLaughlin, M. y Pennock, D. (2019). *La contaminación del suelo: una realidad oculta*. [Archivo PDF]. Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura. <chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/https://www.fao.org/3/i9183es/i9183es.pdf>
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2002). Norma Oficial Mexicana NOM-021-RECNAT-2000, que establece las especificaciones de fertilidad, salinidad y clasificación de suelos. Estudios, muestreo y análisis. [Archivo PDF]. <chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/http://www.ordenjuridico.gob.mx/Documentos/Federal/wo69255.pdf>
- Sela, I. G. (9 de julio de 2022). *La fertilidad del suelo*. Cropaia. <https://cropaia.com/es/blog/la-fertilidad-del-suelo/>

Análisis de Redes Neuronales Convolucionales para el seguimiento de objetos móviles

JOSÉ FERNANDO DELABRA DELOYA
jose.delabra8064@alumnos.udg.mx

PEDRO YAEL CALDERÓN ENCISO
pedro.calderon1244@alumnos.udg.mx

DAMARIS CANO ROBLEDO
damaris.cano3843@alumnos.udg.mx

MIGUEL MORA GONZÁLEZ
miguel.mora@academicos.udg.mx

RESUMEN

En el presente documento se realiza un experimento para probar la eficiencia de Redes Neuronales Convolucionales (CNN de sus siglas en inglés) en el seguimiento y detección en tiempo real de objetos móviles. La metodología utilizada se basa en las siguientes etapas: 1) el estudio de tres CNN especializadas en seguimiento y detección de objetos en tiempo real, estas redes fueron YOLO, SSD y AlexNet; 2) la programación de las mismas en lenguaje Python; 3) construcción de un mecanismo móvil en el plano X-Y, utilizando componentes Lego®; 4) montaje del área de trabajo a utilizar; y por último 5) pruebas de las tres CNNs utilizando diferentes circuitos de movimiento del objeto a detectar, así como distintas tonalidades de iluminación y dos objetos de prueba. Las CNNs YOLO y SSD mostraron su capacidad de seguimiento de objetos en tiempo real, donde SSD tenía un poco más capacidad en el seguimiento del objeto, pero YOLO no tenía falsos positivos, en comparación con SSD que tenían una gran cantidad. Con respecto a AlexNet, esta sólo detectaba el objeto sin darle seguimiento, y mostraba un alto porcentaje de falsos positivos. Al final del experimento se llegó a la conclusión de que, para las condiciones del entorno experimental

y los objetos utilizados, YOLO obtuvo los mejores resultados, ya que no presentó ni falsos positivos ni falsos negativos.

PALABRAS CLAVE

Red Neuronal Convolutiva (Convolutional Neuronal Network), Aprendizaje profundo (deep learning), AlexNet, YOLO, SSD.

INTRODUCCIÓN

El seguimiento de objetos móviles por medios automáticos es una tarea computacionalmente complicada y que requiere muchos recursos computacionales como: memoria, velocidad de procesamiento, óptica adecuada, entre otras. Las redes neuronales, también llamadas redes neuronales artificiales (ANN por sus siglas en inglés) o redes neuronales simuladas, están inspiradas en el cerebro humano, tanto en su nombre como en su estructura. Estas imitan la forma en que las neuronas biológicas se interconectan y funcionan entre sí (¿Qué Son las Redes Neuronales Convolutivas?, s.f.). Hoy en día las ANN son una herramienta computacional muy potente utilizada en el campo de la inteligencia artificial, del cómputo suave o *soft-computing*, entre otros (Bonilla, 2020).

Los sistemas expertos fueron los primeros desarrollos aplicados en el campo de la inteligencia artificial, estos son una colección de reglas que formalizan y reconstruyen la inteligencia humana mediante un enfoque de árbol de decisiones. Sin embargo, la interpretación de datos externos, aprendizajes con los mismos y lograr adaptaciones flexibles fueron tareas complejas que no podían ejecutar (Pino et al., 2022). Esto dio inicio al estudio y desarrollo de redes neuronales artificiales; siendo el primer intento “El perceptrón” en 1958 (Rosenblatt, 1958). Unos años después se abordó la idea de la retro propagación, la cual sirvió para mejorar de los algoritmos con redes ya existentes. A finales del siglo XX, la capacidad de cómputo en los programas, hacía ya posible el procesar el lenguaje natural, e incluso ya eran posibles los chat-bots que fueron bastante populares en los 2000’. Posteriormente, el aprendizaje profundo o *Deep Learning* (DL) empezó a tomar relevancia en el campo médico.

El sobreajuste u *overfitting*, producido en el DL, era un efecto que limitaba el procesamiento de grandes cantidades de datos. Esto generó insuficiencia en la capacidad de cómputo y entrenamientos de baja calidad.

Hasta que logró superarse, después del año 2010, con la aplicación de modelos avanzados de DL como las redes neuronales recurrentes (RNN por sus siglas en inglés) y las redes neuronales convolutivas (CNN por sus siglas en inglés), que tuvieron distintos tipos de aplicaciones, por ejemplo, en el procesamiento digital de imágenes (¿Qué Son las Redes Neuronales?, s.f.).

LeNet se considera la base de todas las redes neuronales convolutivas. Este modelo fue propuesto en 1998 para el reconocimiento óptico, especialmente de caracteres. Su arquitectura está constituida de capas convolutivas 2D, volviéndola una CNN de pequeño tamaño, pero cuenta con una alta efectividad en la precisión de sus resultados. A partir de LeNet surgieron otras arquitecturas que se basan en el mismo principio de capas convolutivas, por lo que hasta el momento podemos encontrar CNNs con mayor rapidez, resolución, precisión, entre otras mejoras (Quiroga, 2020; Barreto & Devia, 2022). Existen valiosos ejemplos de CNNs aplicadas a imágenes, una de ellas es la AlexNet, que fue presentada en 2012 por Alex Krizhevsky et al, la cual es una CNN grande y profunda, diseñada para clasificar alrededor de 1.2 millones de imágenes, con hasta mil clases diferentes (Krizhevsky et al., 2012; Krizhevsky et al., 2017). Otras tres CNNs muy versátiles en el área de seguimiento de imágenes fueron publicadas en 2015, que son: YOLO (por sus siglas en inglés *You Only Look Once*) de (Redmon et al., 2016), que es una CNN diseñada para procesar imágenes en tiempo, aproximadamente 45 fotogramas por segundo (fps); U-Net, que es basada en una arquitectura de “red totalmente convolutiva”, fue desarrollada por (Ronneberger et al., 2015), la aplicación original de esta CNN fue para segmentar pilas de células en imágenes de microscopía electrónica (He et al., 2015); por último, ResNet, creada por He et al, es una CNN residual que facilita el entrenamiento aun cuando la red sea muy profunda (Rodríguez, 2023).

En el presente documento se realiza un análisis del funcionamiento de tres arquitecturas diferentes de CNN, esto para evaluar sus capacidades de detección de objetos en movimiento con diferentes tonalidades en la iluminación. Esto con la finalidad de buscar la mejor opción de CNN para en un futuro acoplarlas con pantallas de cristal líquido (LCD por sus siglas en inglés) en experimentos de óptica difractiva y óptica no lineal. Para el experimento se utilizarán 3 CNN (AlexNet, YOLO y SSD) con imágenes pre-entrenadas, por lo cual, como objeto se utilizan artículos comunes (pelotas de distintos colores).

A continuación, se presenta la sección de materiales y métodos, donde se indica los componentes utilizados en el experimento, así como las metodologías y arquitecturas de CNN utilizadas. Después, se despliegan los resultados obtenidos con cada una de las tres CNN, así como con sus distintos modos de operación (variantes en iluminación, colores de objetos y trayectorias de movimiento). Por último, se presentan las conclusiones obtenidas del trabajo.

MATERIALES Y MÉTODOS

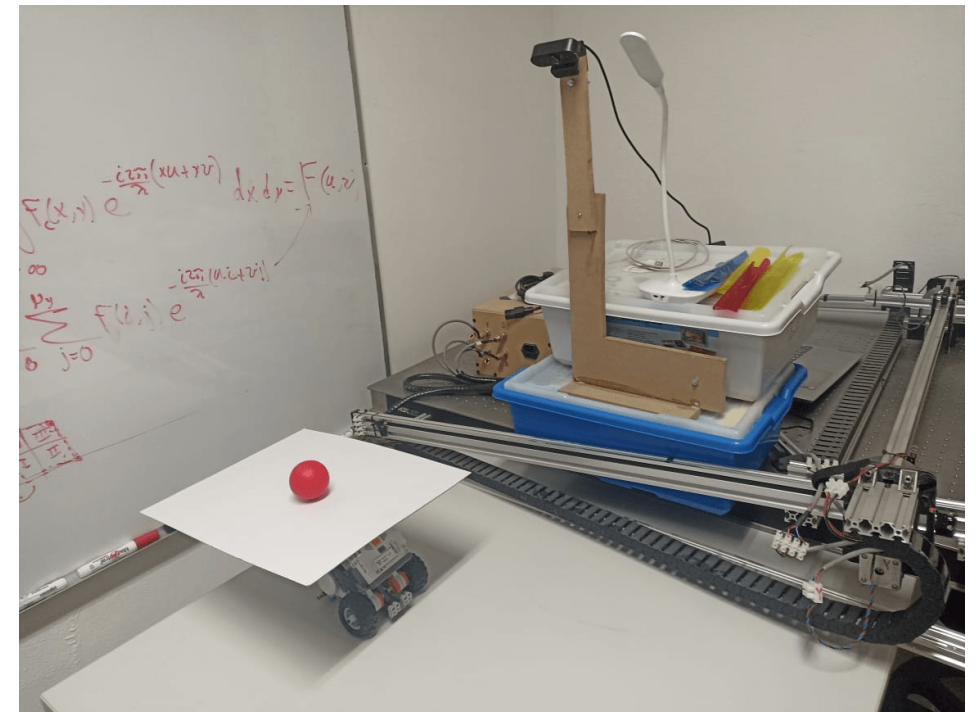
Los materiales empleados en el desarrollo experimental fueron los siguientes: una laptop Lenovo® 81WE, una cámara-web Salandens Full-HD 1080P, un kit Lego® 9797 mindstorms, una lámpara de escritorio genérica con barra de LEDs, una plataforma de madera, papel celofán de varios colores, así como papel cascarón de huevo.

ARREGLO EXPERIMENTAL

En una mesa se montó la cámara web sobre la plataforma de madera para alcanzar una altura de 70 cm, al lado se colocó la lámpara de escritorio con una altura de 65 cm, ambas conectadas a la laptop vía cable USB. Se armó un carro con el microcontrolador del kit mindstorms, para que se moviera en un área de la mesa de 50x44 cm². El carro fue programado para recorrer diferentes circuitos, sobre él se colocó el papel cascaron de huevo y se fijó el objeto a seguir (ver Figura 1). El papel celofán de colores se utilizó para cubrir la barra LED de la lámpara y con esto cambiar el color de la iluminación.

Tres CNNs se analizaron como sistema de visión por computadora, estas fueron: YOLOv5s, SSD300 y AlexNetv.10.0. Estas fueron programadas en lenguaje Python.

Figura 1. Entorno de trabajo con sistema de visión (cámara web), iluminación (lámpara) y plataforma de movimiento (carro mindstorms) para mover objeto (pelota roja).

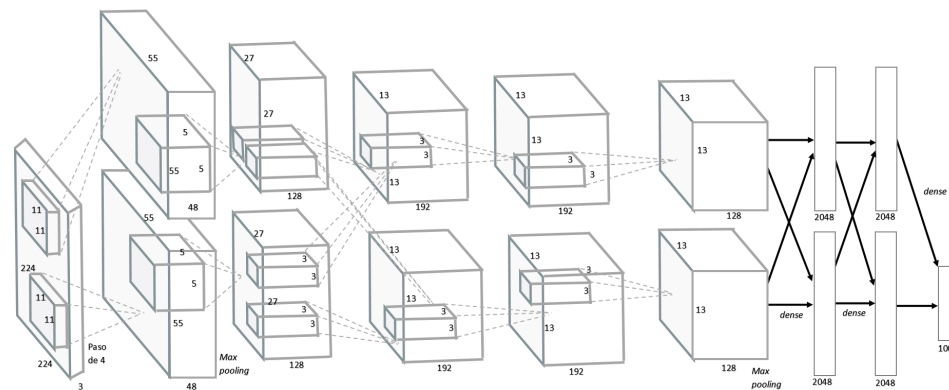


REDES NEURONALES CONVOLUCIONALES

La arquitectura de AlexNet se compone de cinco capas convolucionales y tres capas densas (650,000 neuronas y 65,000 millones de parámetros), como se observa en la Figura 2. Las salidas de las capas convolucionales son normalizadas por lotes. El kernel tiene dimensiones de 11x11 en la primera capa, 5x5 en la segunda, así como de 3x3 en el resto de las capas. La primera, cuarta y quinta capas convolucionales vienen seguidas cada una de ellas por una capa de agrupación (*max-pooling*) de 3x3, en la que existe un desplazamiento de dos píxeles o datos para el filtro, lo que provoca un traslape de las celdas en la misma. Las capas convolucionales y de *pooling* vienen seguidas de tres capas densas. Las dos primeras capas cuentan con 4,096 neuronas cada una. La última capa es de salida y está compuesta por 1,000 neuronas dotadas de una función de activación

encargadas de clasificar las imágenes. La red neuronal es simulada por dos GPUs, cada una de ellas calcula la mitad de los mapas de características de la capa convolucional correspondiente. Las dos GPUs pueden comunicarse directamente, y acceder a la memoria de la otra sin tener que pasar por la CPU. Los mapas de características de la tercera capa convolucional se comunican con todos los mapas de la capa anterior. Sin embargo, los mapas de la cuarta capa sólo se comunican con los mapas de la capa tercera que se encuentran en su GPU (Krizhevsky et al., 2012; Krizhevsky et al., 2017; Redmon et al., 2016; Liu et al., 2016). Para agilizar el entrenamiento se implementó una GPU, este es el mismo hardware que se utiliza para el desarrollo de videojuegos, lo cual es muy eficiente con la rutina computacional de convolución.

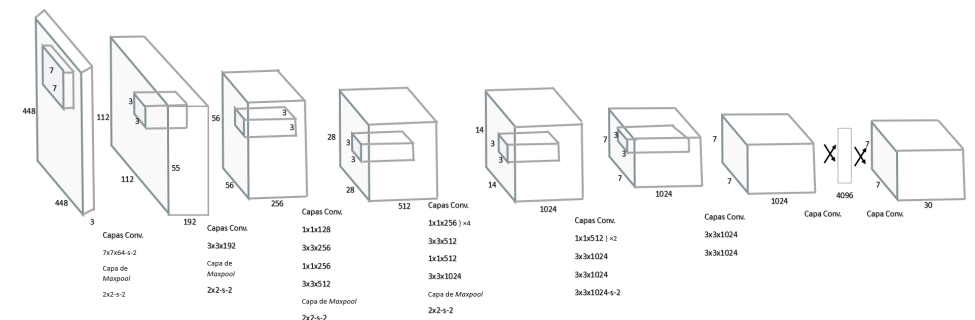
Figura 2. Arquitectura de CNN AlexNet utilizada (Krizhevsky et al., 2017).



YOLO es relativamente más simple en comparación con otras CNNs. Su arquitectura está conformada por 24 capas convolucionales seguidas de dos capas completamente conectadas (Figura 3). Una única red convolucional predice simultáneamente múltiples cuadros delimitadores, así como las probabilidades de una clase para ellos. Esta CNN se entrena con imágenes completas, y optimiza directamente el rendimiento de la detección. El modelo tiene varios beneficios sobre los métodos tradicionales de detección de objetos, no es un proceso complejo, es más rápido, entre otros. Si se utiliza una tarjeta gráfica, la red puede llegar a funcionar

a 150 fps con algunas GPUs comerciales, o por defecto hasta a 45 fps. Para fines prácticos, sirve para procesar imágenes en tiempo real con muy poca latencia, así como, lograr más del doble de la precisión en la segmentación de objetos en tiempo real que la mayoría de las otras CNNs. YOLO infiere globalmente sobre la imagen al hacer predicciones, durante el entrenamiento y el tiempo de prueba, analiza la imagen completa, codificando así la información de las clases y su apariencia para las capas. Además, aprende representaciones generales de los objetos. Ya que es altamente generalizable, es menos probable que falle cuando se aplica a nuevos dominios o entradas inesperadas (Ronneberger et al., 2015). Actualmente existen distintas versiones de YOLO, las cuales tienen mejoras que la vuelven más eficiente, por ejemplo: FastYOLO, YOLOv2, YOLOv3, entre otras. Esto lo vuelve una CNN rápida y más precisa que cualquier otro detector en tiempo real, por lo tanto, es ideal para aplicaciones que consisten en detección y seguimiento de objetos.

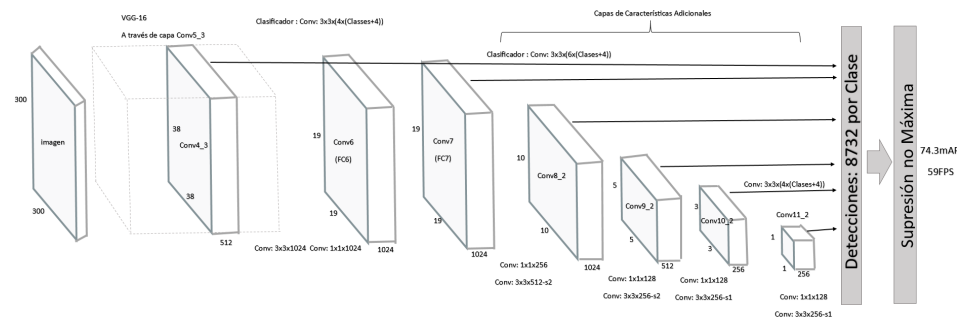
Figura 3. Arquitectura de CNN YOLO utilizada (Redmon et al., 2016).



El enfoque en SSD de Nvidia® se basa en una red convolucional de retroalimentación, la cual produce una colección de cuadros delimitadores de tamaño fijo, así como puntuaciones para la presencia de instancias de clase de objeto en dichos cuadros, que son seguidas de una supresión para producir las detecciones finales (Figura 4). Las primeras capas de red se basan en una arquitectura estándar, utilizada para la clasificación de imágenes de alta calidad. Luego se agrega un auxiliar en la estructura de la red, para producir detecciones con las siguientes características clave, como

son: mapas de características multiescala para detección, predictores convolucionales para detección, cuadros predeterminados y relaciones de aspecto. La SSD discretiza el espacio de salida de cuadros delimitadores, para ponerlos en un conjunto de cuadros predeterminados con diferentes relaciones de aspecto y escalas, ubicados en el mapa de características. Al mismo tiempo, la red genera puntuaciones para la presencia de cada categoría de objeto en cada cuadro predeterminado, y produce ajustes en el cuadro para encontrar las coincidencias de forma con el objeto. La red combina predicciones con múltiples mapas de características, los cuales cuentan con diferentes resoluciones, para manejar así objetos de diversos tamaños de modo más natural. SSD en comparación con otras CNNs, es más simple ya que elimina el cuadro delimitador, propuestas, así como la posterior etapa de remuestreo de píxeles o características, encapsulando todos los cálculos en una sola red (Liu et al., 2016). Esto hace que SSD sea una CNN veloz, fácil de entrenar y de integrar en sistemas de visión.

Figura 4. Arquitectura de CNN SSD utilizada (Liu et al., 2016).

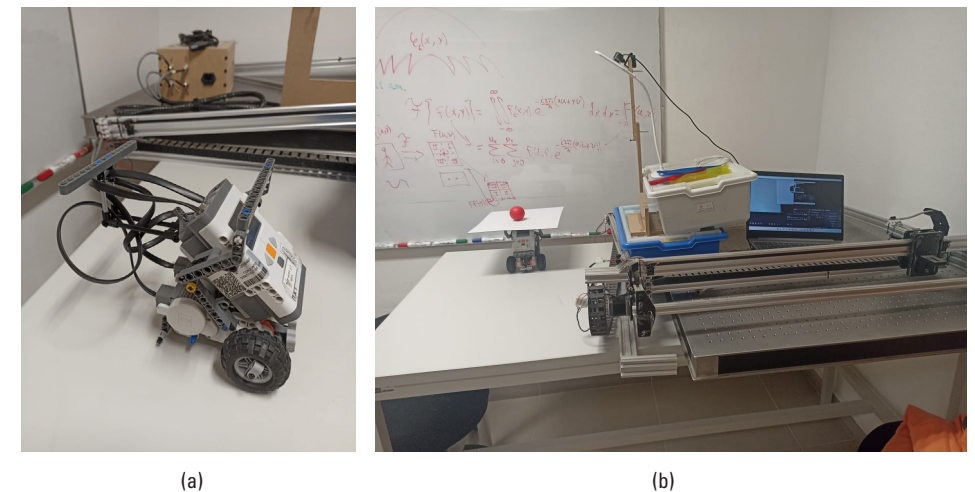


DISEÑO DE PLATAFORMA MÓVIL Y ÁREA DE LOS CIRCUITOS

Utilizando el kit de Lego se construyó un mecanismo sencillo para mover un carro mindstorms sobre la mesa en un plano X-Y (desde una vista superior); se acopló a la unidad central con dos motores, y a ellos una llanta por cada motor. El microcontrolador del mindstorms se colocó a un ángulo de 45° aproximadamente, para facilitar la manipulación de la plataforma o base para el objeto móvil (pelotas de colores); adicionalmente, se conectaron dos vigas en la parte superior, para soportar la base

elaborada con papel cascarón de huevo blanco (ver Figura 5a), esto para ocultar el carro al sistema de visión y facilitar el reconocimiento del objeto a detectar, la pelota. Tanto la cámara web como la lámpara de iluminación, se colocaron en una sección de la mesa para dejar un espacio de 50x44 cm² para que el carro recorriera las trayectorias programadas o circuitos, como se observa en la Figura 5b.



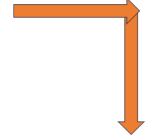
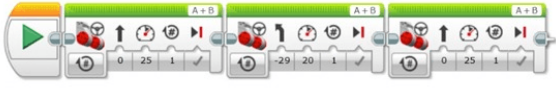
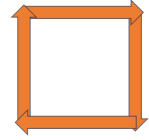

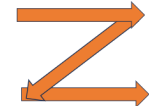

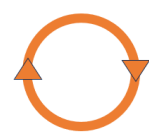

Figura 5. Carro Lego o mecanismo móvil X-Y. a) vigas para sostener plataforma; b) área para circuitos.



PROGRAMACIÓN DEL MINDSTORMS DE LEGO®

Se programaron 5 circuitos de movimientos diferentes, esto para evaluar el funcionamiento de las 3 CNNs para seguir al objeto en tiempo real. Los circuitos programados son una recta, una escuadra, un bloque cuadrado, un zigzag o Z, así como un circuito circular, tal y como se observa en la Tabla 1. En la misma tabla se observan los programas en la plataforma mindstorms.

Tabla 1. Circuitos y programas para el movimiento X-Y del carro Lego®.

No.	Circuito	Recorrido	Programas o secuencias de los circuitos
1	Recta		
2	Escuadra		
3	Cuadrado		
4	Zigzag		
5	Circulo		

RESULTADOS

En el experimento se utilizaron dos objetos a observar: objeto 1, fue una pelota roja del mismo kit Lego®; objeto 2, fue una pelota amarilla de frontón. El análisis se llevó a cabo con diferentes tonalidades de iluminación, para esto se modificó la iluminación forrando el panel LED de la lámpara con diferentes colores de papel celofán (máscara de celofán): sin papel (luz blanca), azul, amarillo, rojo y verde. Se realizó un mapeo de los recorridos de los dos objetos en los circuitos observados en la Tabla 1. En la Figura 6, se muestran las detecciones de la CNN YOLO para los dos objetos,

observando que YOLO tenía mejor detección hacia la pelota amarilla, como se observa en los resultados de la Tabla 2. En la Figura 7, se exponen las detecciones de la CNN SSD para ambos objetos, observando que, a diferencia de YOLO, SSD le era indiferente el color del objeto, ya que fueron los mismos resultados de detección para ambas pelotas, como se observa en los resultados de la Tabla 3. Dependiendo del circuito o movimiento, tanto YOLO como SSD mostraron mejor detección con luz blanca, pero cabe hacer mención que para SSD varios circuitos mostraron indiferencia en el color de iluminación, como fueron la recta, la escuadra y el circular. Se elaboró un video con los funcionamientos de reconocimiento tanto de YOLO como SSD en los circuitos preestablecidos, dicho video se publicó en la plataforma YouTube (PedroStark10, 2023). En total se realizaron 150 pruebas diferentes, con las siguientes combinaciones: 2 objetos, 3 CNNs, 5 circuitos y 5 tonalidades de iluminación.

El caso de la CNN AlexNetv1.0.0, no muestra el seguimiento en tiempo real de los objetos, pero sí indica en pantalla el estatus de reconocimiento y el tipo de objeto reconocido, así como la probabilidad de que el objeto pertenezca a la clase que se está indicando. Por ejemplo, en la Figura 8a se observa que AlexNet indica que hay una probabilidad del 19.82 % de que el objeto que está analizando sea un sobre, esto debido a que está reconociendo la base móvil y no la pelota. En la Figura 8b-c, se observan imágenes del funcionamiento de YOLO y SSD.

En la Figura 9, se muestra la matriz de confusión del experimento, la cual apoya a la interpretación de los datos obtenidos en el trabajo y reflejados en las Tablas 2 y 3. En dicha matriz se dice que, si la CNN detecta al objeto y éste está en escena, la predicción indica un verdadero positivo, en cambio si no se detecta al objeto la predicción será un falso negativo. Por lo contrario, cuando el objeto no aparece en escena, si la CNN lo detecta entonces la predicción será un falso positivo, y si no lo detecta será un verdadero negativo. Por lo cual, lo ideal para el análisis que se realiza en el presente documento es que la CNN en cuestión tenga predicción verdadero positivo o verdadero negativo. En la Figura 10 se observa un ejemplo de como la CNN SSD300 está detectando falsos positivos al mismo tiempo que un verdadero positivo, esto es, en los 4 recuadros rojos grandes está detectando una carpeta u otro objeto que no existe (falsos positivos), en cambio en el recuadro pequeño de la izquierda detecta la pelota (verdadero positivo).

Figura 6. Mapeo utilizando YOLOv5s.

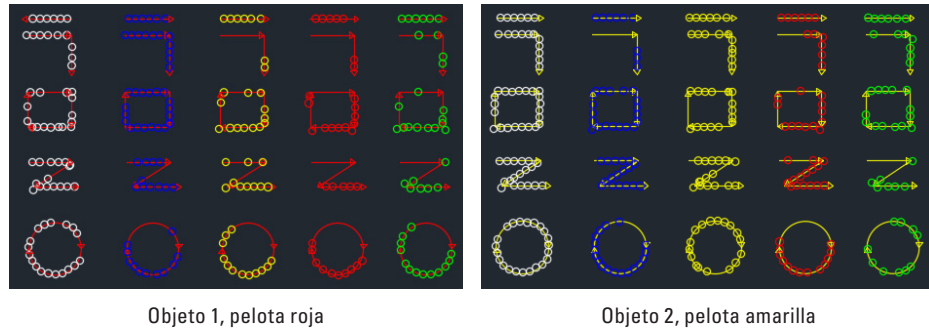


Tabla 2. Resultados en la detección de objetos (Ob. 1 y Ob. 2) de la CNN YOLO en los 5 circuitos.

Iluminación	Recorridos de los objetos en los circuitos									
	Recta		Escuadra		Cuadrado		Zigzag		Circular	
	Ob. 1	Ob. 2	Ob. 1	Ob. 2	Ob. 1	Ob. 2	Ob. 1	Ob. 2	Ob. 1	Ob. 2
Roja	5	6	2	6	12	12	5	15	10	13
Verde	6	6	4	7	12	14	7	7	13	10
Amarilla	6	6	2	10	13	15	10	16	12	17
Azul	6	6	11	3	19	20	11	17	11	18
Blanca	6	6	9	11	16	22	16	18	18	22

Figura 7. Mapeo utilizando SSD300.

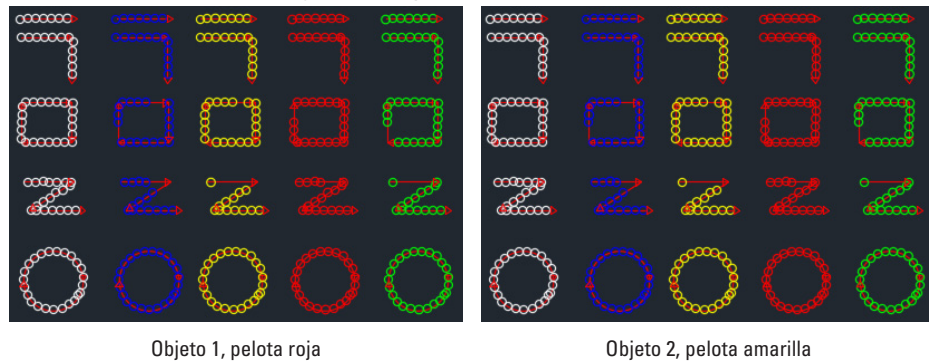
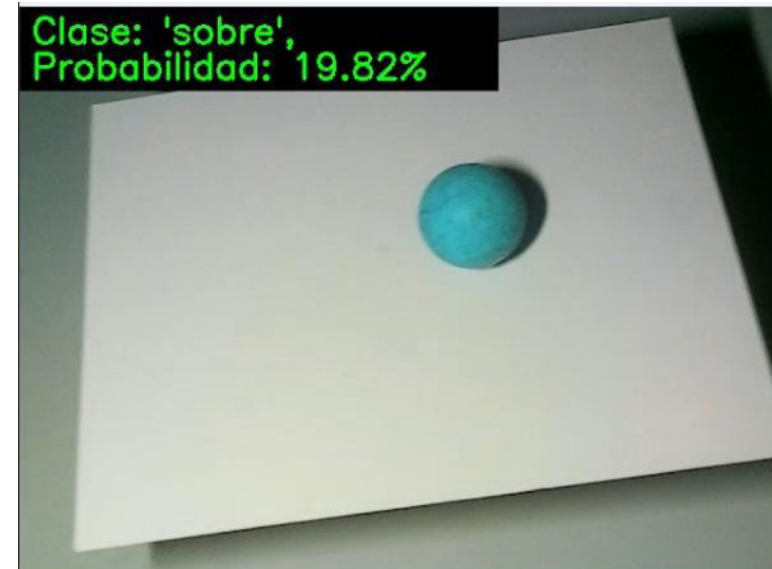


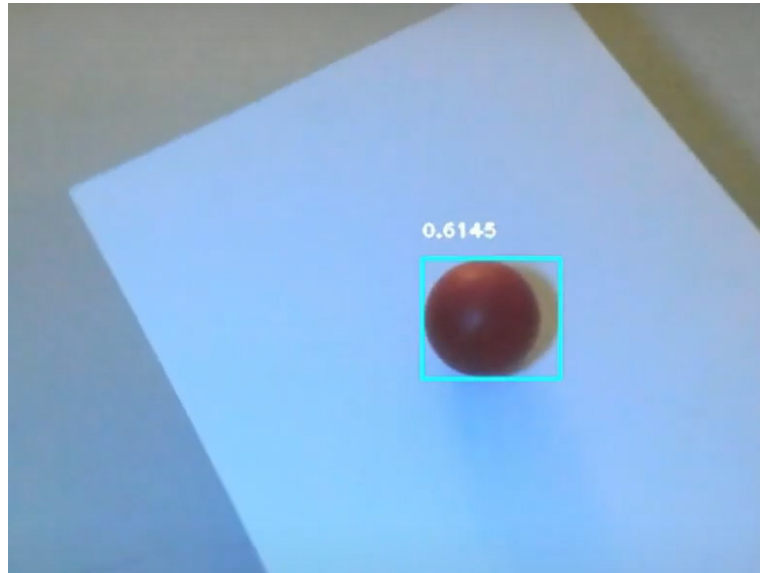
Tabla 3. Resultados en la detección de objetos (Ob. 1 y Ob. 2) de la CNN SSD en los 5 circuitos.

Iluminación	Recorridos de los objetos en los circuitos									
	Recta		Escuadra		Cuadrado		Zigzag		Circular	
	Ob. 1	Ob. 2	Ob. 1	Ob. 2	Ob. 1	Ob. 2	Ob. 1	Ob. 2	Ob. 1	Ob. 2
Roja	7	7	12	12	21	21	18	18	24	24
Verde	7	7	12	12	20	20	15	15	24	24
Amarilla	7	7	12	12	21	21	13	13	24	24
Azul	7	7	12	12	19	19	15	14	24	24
Blanca	7	7	12	12	23	23	20	20	24	24

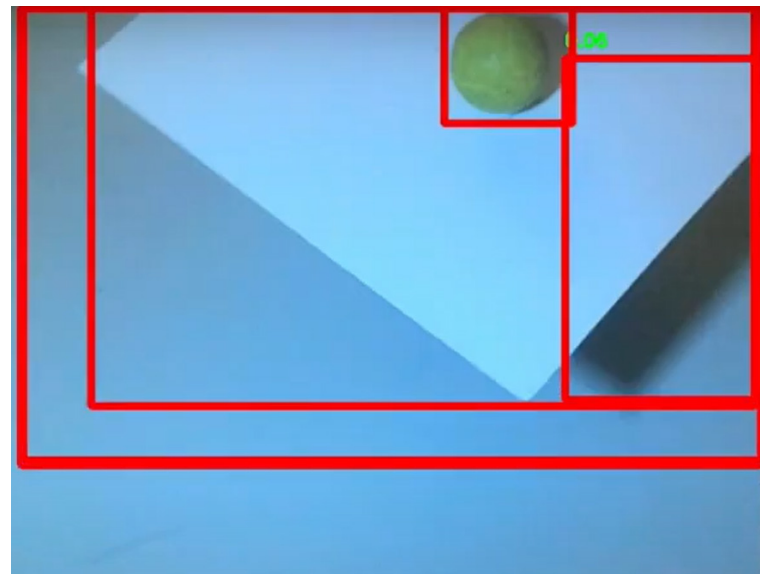
Figura 8. Funcionamiento de las CNNs detectando el objeto: a) AlexNet; b) YOLO; y c) SSD.



(a)



(b)



(c)

Figura 9. Matriz de confusión para la detección del objeto.





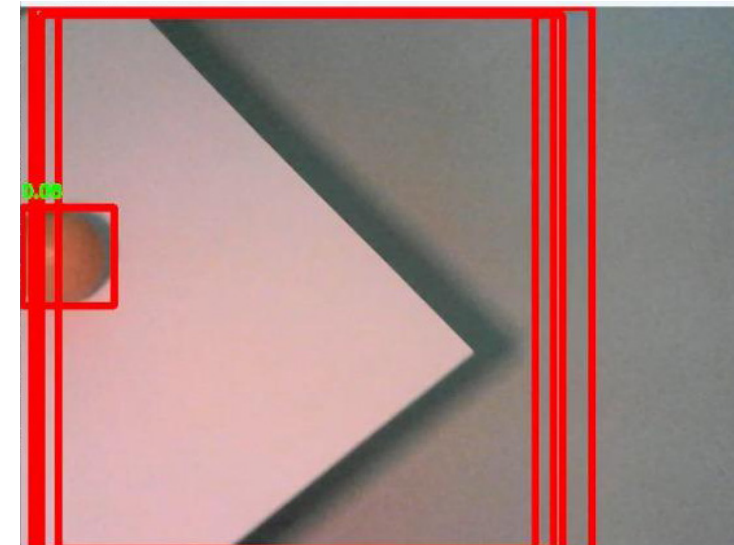
		VALORES DE PREDICIÓN	
		POSITIVO	NEGATIVO
VALORES REALES	POSITIVO	VERDADERO POSITIVO  Está el objeto y lo detecta	FALSO NEGATIVO  Está el objeto y no lo detecta
	NEGATIVO	FALSO POSITIVO  No está el objeto y lo detecta	VERDADERO NEGATIVO  No está el objeto y no lo detecta

Figura 10. SSD detectando falsos positivos.



Otro tipo de análisis que se puede realizar es el utilizar mapas de calor para observar la interacción de los datos al correlacionarse. Por ejemplo, en la Figura 11, se observa el mapa de calor de la correlación de los datos de la Tabla 2, observando la interacción del objeto 1 (pelota roja) con el objeto 2 (pelota amarilla), esto al utilizar reconocimiento YOLO. En dicha correlación se observa que entre más claro es el color, entonces más se parece al resultado que se está correlacionando, y entre más oscuro entonces menos se parece. En los cambios de color de dicha figura se observa que conforme el resultado de la correlación cruzada se acerca a la unidad, entonces el dato se acerca a la auto-correlación, esto significa que la detección del objeto es similar al máximo de la misma, donde se tiene una disposición hacia los colores claros o calientes del mapa. En cambio, conforme el mapa de calor se acerca a cero, la detección del objeto en estos escenarios es muy diferente, tendiendo el mapa hacia los colores oscuros o más fríos. Los datos de la Tabla 3 no se muestran como mapa de calor, ya que al correlacionar los datos se tiene una predisposición de indeterminación de sus resultados, esto por la similitud de los datos.

Figura 11. Mapa de calor, correlación cruzada de los datos de la Tabla 2 con CNN YOLO.



CONCLUSIONES

Dado el entorno utilizado para la experimentación propuesta, esto es circuitos, objetos a reconocer y CNNs utilizadas, se puede concluir lo siguiente:

- Que la CNN SSD300 tiene una mayor tasa de reconocimiento que las otras dos redes utilizadas. Pero también tiene el mayor número de falsos positivos presentados en el experimento.
- Con respecto a la velocidad de reconocimiento, se tiene que AlexNetv10.0 no demanda tantos recursos computacionales (tanto en hardware como en software), por lo cual es la red que más rápido detecta objetos, el problema es que muchos de ellos son falsos positivos.
- YOLOv5s es la CNN con menor cantidad de falsos positivos en sus detecciones; sólo detecta cuando se encuentra alguno de los objetos propuestos.

Debido a esto, se puede concluir que YOLO es una red neuronal convolucional más robusta que AlexNet y SSD, esto para el seguimiento de pelotas bajo condiciones de iluminación variable. Además de que no requiere demasiados recursos de hardware para su implementación, ya que en comparación con SSD, ésta última debe estar optimizada para GPU. AlexNet es una muy buena red neuronal convolucional, pero para el seguimiento de objetos queda muy limitada.

Como trabajo a futuro, se pretende realizar un mecanismo x-y-z y accionado con una CNN de seguimiento de objetos, esto con la finalidad de aplicarlo a resolver problemas de visión artificial tanto cotidianos como del ámbito ingenieril.

REFERENCIAS

Barreto Jiménez, J. S. y Devia Bastos, J. C. (2022). *Implementación embebida de LeNet para clasificación de dígitos en video*. [Tesis de pregrado, Pontificia Universidad Javeriana]. <https://repository.javeriana.edu.co/handle/10554/65213>

Bonilla Carrión, C. (2020). *Redes Convolucionales*. [Trabajo Fin de Grado, Universidad de Sevilla]. <https://idus.us.es/bitstream/handle/11441/115221/TFG%20DGM%20Bonilla%20Carri%C3%B3n%20Carmelo.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

- He, K., Zhang, X., Ren, S. y Sun, J. (10 de diciembre de 2015). *Deep Residual Learning for Image Recognition*. Cornell University. <https://arxiv.org/abs/1512.03385>
- Krizhevsky, A., Sutskever, I. y Hinton, G. E. (2012). ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks. *Neural Information Processing Systems*, 25 1097-1105.
- Krizhevsky, A., Sutskever, I. y Hinton, G. E. (2017). ImageNet classification with deep convolutional neural networks. *Communications of the ACM*, 60(6), 84-90. <https://doi.org/10.1145/3065386>
- Liu, W., Anguelov, D., Erhan, D., Szegedy, C., Reed, S., Fu, C. y Berg, A. C. (2016). SSD: Single Shot MultiBox Detector. *Springer Link* 9905 21-37. https://doi.org/10.1007/978-3-319-46448-0_2
- PedroStark10. (23 de octubre de 2023). YOLO vs SSD vs AlexNet [Rchivo de video]. YouTube. https://www.youtube.com/watch?v=_sYBAvQxebA
- Pino, L. E., V., Rico, A. E. y Hernández, A. (2022). Del ábaco a las redes neuronales o la breve historia de la inteligencia artificial en salud. *Medicina*, 43(4), 514-526. <https://doi.org/10.56050/01205498.1641>
- ¿Qué son las redes neuronales? (s.f.). IBM - México. <https://www.ibm.com/mx-es/topics/neural-networks#Historia+de+las+redes+neuronales>
- ¿Qué son las redes neuronales convolucionales? (s.f.). IBM - México. <https://www.ibm.com/mx-es/topics/convolutional-neural-networks>
- Quiroga, F. (2020). *Medidas de invarianza y equivarianza a transformaciones en redes neuronales convolucionales*. [Tesis de posgrado, Universidad Nacional de la Plata]. <https://doi.org/10.35537/10915/90903>
- Redmon, J., Divvala, S., Girshick, R. y Farhadi, A. (9 de mayo de 2016). *You Only Look Once: Unified, Real-Time Object Detection*. Cornell University. <https://arxiv.org/abs/1506.02640>
- Rodríguez Abril, R. (4 de septiembre de 2023). *AlexNet y clasificación de imágenes*. La Máquina Oráculo. <https://lamaquinaoraculo.com/deep-learning/alexnet/>
- Ronneberger, O., Fischer, P. y Brox, T. (2015). U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation. *Springer Link* 9351 234-24. https://doi.org/10.1007/978-3-319-24574-4_28
- Rosenblatt, F. (1958). The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychological Review*, 65(6), 386-408. <https://doi.org/10.1037/h0042519>

Estimación de la tasa metabólica en bovederos

ÁNGEL DE JESÚS TORRES PADILLA
angel.torres4892@alumnos.udg.mx

JONATHAN ADAIR MORA RAMOS
jonathan.mora6635@alumnos.udg.mx

MARIO ALBERTO VILLEGAS ROMERO
alberto.villegas@academicos.udg.mx

RESUMEN

Se analizaron las actividades necesarias para la construcción de un techo de bóveda para realizar una simulación de los movimientos que realizan los trabajadores; se identificaron variables y se realizó un diseño de experimentos con tres factores a dos niveles para simular las actividades, además se analizó el consumo metabólico en una muestra a conveniencia con 9 participantes, los cuales realizaron con movimientos controlados la simulación de las actividades analizadas. Se calculó el gasto energético que conlleva realizar estas actividades y se realizó un análisis de riesgos musculo-esquelético, arrojando como resultado riesgos por sobre esfuerzo en los brazos principalmente además de representar un gasto en promedio de 1000 kcal.

PALABRAS CLAVE:

Bóveda (vault), Músculo (muscle), Metabolismo (metabolism), Riesgos (risks), Posturas (posture)

INTRODUCCIÓN

Según el Instituto Mexicano del Seguro Social (IMSS), del 2008 al 2018 en promedio se presentaron alrededor de 527,802 riesgos de trabajo por año, ya sean accidentes de trabajo, de trayecto o enfermedades, por lo cual se puede estimar que ocurren en promedio 1,446 riesgos de trabajo por día en todo el territorio nacional (Joel, 2020).

En el 2016, el IMSS obtuvo como las estadísticas de que las enfermedades con mayor número de incidencia son la hipoacusia, la neumoconiosis, y afecciones respiratorias, además, se observa un número importante de enfermedades de trabajo que se agrupan como trastornos músculo-esqueléticos (TME) (Trabajo seguro - DGSST, 2018), por cual los TME se pueden considerar como un problema real en la salud de los mexicanos. Algunas causas más comunes en el mundo laboral: el participar en movimientos repetitivos, levantar cargas excesivas, mantener una mala postura en el trabajo (Eidos, 2022), causas vistas en trabajos manuales productivos.

En México, se estima que el 8.4% de la población trabajadores son albañiles, por lo cual una gran cantidad de familias reciben el sustento de esta actividad (García, 2018), así que una gran cantidad de personas suelen realizarlas durante gran parte de su vida, usualmente sin cuidados o precauciones, lo cual puede provocar lesiones a futuro en brazos, espalda, rodillas y dedos.

Los principales riesgos en el trabajo están relacionados con la demanda física de la tarea a realizar, como posturas, movimientos, repeticiones, vibraciones y carga estática y dinámica.

La posición corporal que una persona adopta para realizar un determinado trabajo, el tiempo que este se mantiene, la fuerza desarrollada y los movimientos pueden ser la causa de numerosas lesiones musculoesqueléticas. (Gómez, 2002)

En el 2020, el IMSS, obtuvo en sus cifras que la albañilería se encuentra en el top 10 de trabajos con más accidentes en México, esto con 6 mil 657 accidentes registrados en el 2020 (Trejo, 2022).

Como parte de los trabajos que se realizan en la albañilería, la realización de bóveda, es “en el terreno de la arquitectura, se llama bóveda a una estructura arqueada que permite la cobertura del espacio existente entre dos apoyos. La bóveda, por lo tanto, sirve como cubierta o compone el techo de la construcción” (Porto y Gardey, 2017), misma que suele aportar rasgos estéticos a las construcciones. La realización de una bóveda es en pocas palabras, la realización de techo con un tipo de ladrillos llamados cuñas, las cuales se acomodan de diferentes formas para agregar un diseño especial al techo de la habitación, siendo pegadas con mezcla de

cemento y arena entre sí, soportadas por viguetas, las cuales apoyaran el fortalecimiento del techo. Por lo regular, la bóveda se tiende a realizar en rectángulos rodeados por viguetas donde se rellenarán de cuñas.

En el desarrollo de esta actividad, los albañiles suelen realizar esta actividad de pie y realizando movimientos repetitivos, realizando esfuerzos y manteniendo posturas incómodas, además del riesgo que puede significar el trabajar en altura, son algunos de los riesgos que se pueden encontrar en la realización de esta actividad, así que esta profesión es un claro ejemplo de los riesgos potenciales ergonómicos que viven los trabajadores de la construcción.

El metabolismo en los trabajadores puede ser un factor de interés para evaluar riesgos potenciales a la salud. “El metabolismo del cuerpo implica todas las reacciones químicas de las células del cuerpo. Esto incluye una serie de procesos de oxidación que convierten la energía química contenida en los alimentos en energía térmica y energía mecánica —trabajo muscular— (Falcone et al., 2023), entonces el consumo metabólico es la cantidad de energía que necesita el trabajador para realizar sus actividades.

“El sistema músculo-esquelético es uno de los principales componentes tisulares del cuerpo humano. Su función principal es convertir la energía química en trabajo mecánico. Suele estar bajo el control voluntario del sistema nervioso central.” (Laurent, 2010). Por lo que un análisis del sistema músculo esquelético servirá para tratar de comprender la fatiga y carga postural, siendo éstos factores importantes en la evaluación de riesgos, al realizar análisis músculo-esqueléticos, los resultados pueden brindar información sobre las zonas del cuerpo se ven más afectadas en las posturas que los bovederos tienden a realizar, esta información será útil para evaluar el nivel de riesgo que conlleva la realización de esta tarea.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para la realización de las evaluaciones, se visitó a tres albañiles para analizar sus actividades, tanto de limpieza como de bóveda alta y baja. Se grabó con una cámara *GoPro* con el fin de observar detalladamente las actividades realizadas en las simulaciones.

Las actividades se categorizaron en tres grupos, bóveda nivel alto, bóveda nivel bajo y limpieza. A la limpieza se decidió agregar limpieza sin peso, ya que se puede realizar también con un palo de madera, lo cual

reduce la carga. Una vez definidas estas actividades se dividió en niveles, y puesto que la bóveda se realiza mediante líneas de ladrillo, se evaluó con las tres líneas más lejanas del bovedero, que es donde radica más esfuerzo y dificultad.

La evaluación se realizó con un estudio de tiempos y movimientos mediante diagramas bimanuales para cada una de las actividades. De esta forma, se descartaron movimientos innecesarios y se seleccionaron los movimientos para realizar en la simulación. Una vez definidos los movimientos, se realizó una evaluación de tiempos estándar con ayuda de una hoja de cálculo y un cronómetro digital para medir los tiempos de los albañiles —y sujetos sin experiencia— y así observar las diferencias de desempeño y habilidades de cada uno, además se agregaron suplementos que se pueden presentar en la actividad. Con estos dos elementos, cálculo del promedio y suplementos, se estableció un tiempo estándar para la realización de esta actividad constantemente durante ocho horas, y estos tiempos fueron los que se respetaron durante las simulaciones.

Para la realización de la simulación de bóveda se utilizó una estructura de madera, adaptable a la altura, en donde se diseñó, de forma similar, la estructura en las que se hace la bóveda en las casas. A esta estructura se le dieron pequeñas pestañas para que las cuñas puedan sentarse, tal cual como se realiza en las viguetas de las casas. Para el pegado entre cuñas se utilizó velcro en la parte interior y en las caras de la estructura con el fin de que se adhirieran mejor.

Figura 1. Estructura de la simulación nivel bajo



Figura 2. Bóveda nivel alto



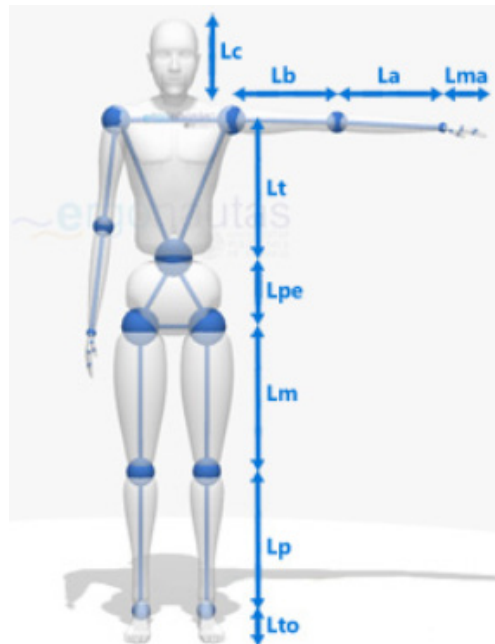
Para facilitar la realización de la simulación se numeró cada cuña y se le acomodó en orden, para que cada participante en el experimento identifique el orden con facilidad y controlar los movimientos durante la simulación.

En cuanto la estimación de la tasa metabólica, análisis músculo-esquelético y la lectura de los electrodos, se utilizaron diferentes softwares. En el caso de la estimación de la tasa metabólica se utilizó un software de ergonomía para el método MET (Diego-Mas, 2015.). Con este software se logró calcular cuál es el gasto energético para cada persona, ya que dependiendo de las características físicas puede significar mayor o menor gasto. Como complemento se utilizó la fórmula de tasa metabólica basal Harris Benedict para calcular el gasto energético del individuo en reposo. Como extra se utilizaron las tablas de la norma NTP 323: determinación del metabolismo energético, en la cual mediante la separación de movimientos logramos calcular el gasto energético (Ministerio de trabajo y asuntos sociales de España, 1995), además se utilizó la calculadora en línea de tasa metabólica basal MyFitnessPal. (Calculadora de BMR)

En el análisis músculo-esquelético, se utilizó el software de ergonomía para realizar el método BIO- MEC (Diego-Mas, s. f.) este método tiene en cuenta algunas variables, tales como lo son las posturas, el coeficiente de rozamiento, la repetitividad de la postura, el peso de la carga, la edad, la estatura, el peso, etc. Al igual se tienen que medir ciertas dimensiones

antropométricas como la altura de la cabeza, la distancia del hombro al codo, la distancia del codo a la muñeca, la distancia de la muñeca al dedo, la medida del brazo estirado a la cintura, la distancia de la cintura a la cadera, la distancia de la cadera a la rodilla, la distancia de la rodilla al tobillo y la distancia del tobillo al suelo.

Figura 3. Dimensiones antropométricas medidas para el experimento
(Diego-Mas, s. f.-b)



Este método mostró qué músculos y partes del cuerpo tienen más peligro y qué tanto se acerca al límite del músculo, evidenciando las áreas en las que se corre mayor riesgo.

RESULTADOS

Las simulaciones se realizaron en diferentes etapas y se seleccionaron sujetos de prueba para cada experimento, así que en total se utilizaron nueve sujetos, pues a pesar de que son doce experimentos, algunos sujetos participaron en más de uno.

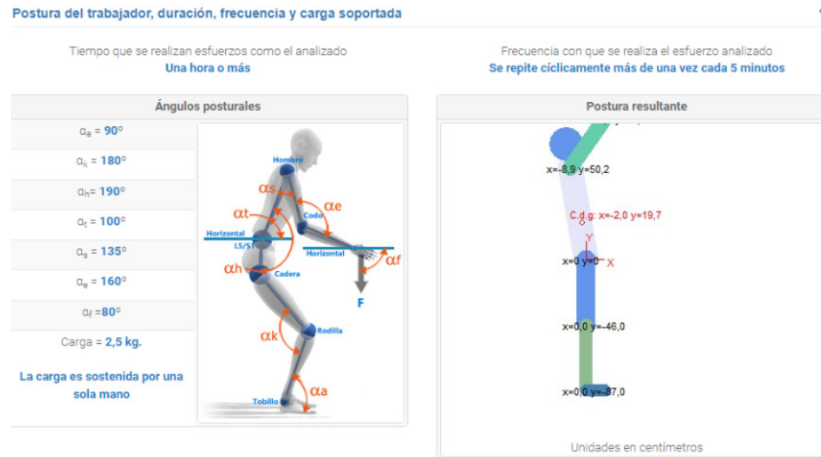
Los experimentos realizados son los siguientes:

1. Bóveda nivel alto con distancia lejana (BAL)
2. Bóveda nivel alto con distancia media (BAM)
3. Bóveda nivel alto con distancia cercana (BAC)
4. Bóveda nivel bajo con distancia lejana (BBL)
5. Bóveda nivel bajo con distancia media (BBM)
6. Bóveda nivel bajo con distancia cercana (BBC)
7. Limpieza con distancia lejana con peso (LLP)
8. Limpieza con distancia media con peso (LMP)
9. Limpieza con distancia cercana con peso (LCP)
10. Limpieza con distancia lejana sin peso (LLS)
11. Limpieza con distancia media sin peso (LMS)
12. Limpieza con distancia cercana sin peso (LCS)

Los análisis músculo-esqueléticos de cada experimento se llevaron a cabo recreando la postura que el sujeto de prueba realizó durante la elaboración del experimento, además se agregaron las medidas antropométricas antes mencionadas.

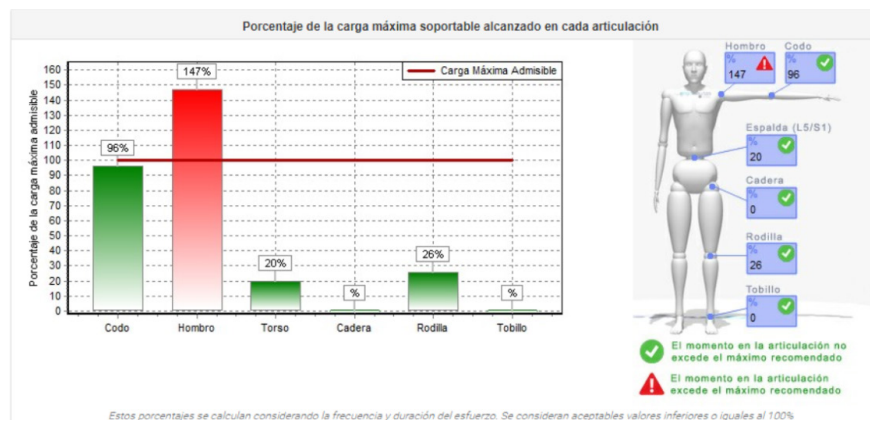
En la figura 4 mostramos un ejemplo de la postura evaluada para el experimento BAL, donde el sujeto estira los brazos hacia enfrente y hacia arriba, además muestra los ángulos de su cuerpo y de la carga que este realizó. Una vez que la postura se recreó, junto con las medidas, el software representó gráficamente las partes del cuerpo que tienen riesgo en la postura, así encontrando que músculos están por encima de sus límites de carga durante la elaboración de la actividad y, por consecuencia, encontrar los niveles de riesgo de la actividad.

Figura 4. Ejemplo de postura para el experimento BAL (Diego-Mas, s. f.-b)



A continuación, en la figura 5 se presenta un ejemplo de los resultados del análisis músculo-esquelético donde se puede observar que tanto el hombro como el codo se encuentran muy cerca del límite o están por encima de este. Con estos resultados, se analizará si la realización de bóveda representa un riesgo en la mayoría de sus posturas.

Figura 5. Ejemplo de resultados de análisis músculo-esquelético del experimento BAL (Diego-Mas, s. f.-b)



A continuación, en la tabla 1, se muestran los resultados de los análisis de todos los experimentos realizados y, por otro lado, en la tabla 2, los ángulos de las partes del cuerpo, al igual que de la carga:

Tabla 1. Resultados de los análisis músculo-esqueléticos

Experimento	Porcentaje de carga máxima realizado en el experimento					
	Codo	Hombro	Torso	Cadera	Rodilla	Tobillo
BAL	96 %	147 %	20 %	0%	26 %	0 %
BAM	37 %	80 %	3 %	7%	19 %	36 %
BAC	42 %	57 %	39 %	13%	61 %	0 %
BBL	112 %	154 %	224 %	239%	N/A	N/A
BBM	96 %	129 %	206 %	207%	N/A	N/A
BBC	89 %	90 %	104 %	98%	N/A	N/A
LLP	84 %	96 %	30 %	18.30%	17 %	14.30 %
LMP	68 %	81.30 %	32 %	14.30%	11.66 %	6.67 %
LCP	33 %	21.30 %	24 %	6.67%	16.33 %	3.33 %
LLS	20 %	24 %	8 %	5%	4 %	4 %
LMS	16 %	21 %	8 %	3%	3 %	2 %
LCS	8 %	0 %	2 %	0%	2 %	0 %

Tabla 2. Ángulos de las posturas por experimento

Experimento	Ángulos de la parte del cuerpo en la postura							Carga
	Codo	Hombro	Torso	Cadera	Rodilla	Tobillo	Carga	
BAL	1.6	1.35	1	1.9	1.8	0.9	80	2.5 kg
BAM	1.1	1.25	0.9	1.8	1.8	0.9	80	2.5 kg
BAC	1.6	1.55	0.95	1.85	1.8	0.9	80	2.5 kg
BBL	1.5	0.9	0.6	1.4	175	85	85	2.5 kg
BBM	1.4	0.65	0.55	1.45	1.75	85	85	2.5 kg
BBC	1	0.2	0.7	1.5	165	85	85	2.5 kg
LLP	1.6	1.35	1	1.9	1.8	0.9	80	1.5 kg
LMP	1.1	1.25	0.9	1.8	1.8	0.9	80	1.5 kg
LCP	1.6	1.55	0.95	1.85	1.8	0.9	80	1.5 kg
LLS	1.6	1.35	1	1.9	1.8	0.9	80	0.2 kg
LMS	1.1	1.25	0.9	1.8	1.8	0.9	80	0.2 kg
LCS	1.6	1.55	0.95	1.85	1.8	0.9	80	0.2 kg

Como se puede observar en la tabla 1, la parte superior del cuerpo es la que tiene la mayor cantidad de riesgos en las actividades de bóveda, siendo las actividades de limpieza las menos peligrosas para los trabajadores y en la actividad de bóveda nivel bajo, en sus tres distancias, las de mayor porcentaje de sobrecarga, siendo el torso la parte del cuerpo con más peligro debido al ángulo del cuerpo.

Para la limpieza se hizo un promedio de los datos de los 3 sujetos, ya que los 3 fueron similares. Se puede apreciar que en la simulación de la construcción de bóveda en nivel bajo (a la altura de la cintura) es la actividad más peligrosa, afectando a la espalda y brazo en un porcentaje alto.

Como última fase de los resultados obtenidos durante este experimento, se mostrarán los resultados de la estimación de la tasa metabólica. Para esto se hicieron separaciones en rangos de edades, ya que el gasto energético depende en gran medida de la edad del trabajador, por lo cual se encontrará el gasto energético en los diferentes rangos de edad:

Figura 6. Gasto energético de 24 a 27 años (Diego-Mas, s. f.)

Tasa metabólica	
Componente	Valores (W/m²)
Metabolismo basal	47,35
Metabolismo postural	30
Metabolismo por actividad	75
Metabolismo por desplazamiento	0
Tasa metabólica global	152 W/m² - 2,61 met.

Rango de edad de 24 a 27 años: 152 w/m² = 233.016 kcal/h

Figura 7. Gasto energético de 22 a 23 años (Diego-Mas, s. f.)

Tasa metabólica	
Componente	Valores (W/m²)
Metabolismo basal	46,68
Metabolismo postural	30
Metabolismo por actividad	75
Metabolismo por desplazamiento	0
Tasa metabólica global	152 W/m² - 2,61 met.

Rango de edad de 22 a 23 años: 128 w/m² = 196.224 Kcal/h

Figura 8. Gasto energético de 19 años (Diego-Mas, s. f.)

Componente	Valor (W/m²)
Metabolismo basal	49,09
Metabolismo postural	30
Metabolismo por actividad	75
Metabolismo por desplazamiento	0
Tasa metabólica global	154,09 W/m² - 2,65 met.

Rango de edad 19 años: 154.09 w/m² = 236.2199 Kcal/h

Como se puede observar en los resultados de las figuras 6, 7 y 8, los rangos de edad afectan directamente al gasto energético. En una edad más corta el gasto energético es mayor y conforme avanza la edad va aumentando el gasto energético, y dicho gasto afecta más por la postura y actividad, al igual que en la tasa metabólica basal.

Para cada sujeto se calculó su tasa metabólica basal con las fórmulas de Harris Benedict, donde se obtuvieron los siguientes resultados:

1. Sujeto 1: $6.5+(13.75*75.1)+(5*170)-(6.78*19)=1820.305$ Kcal
2. Sujeto 2: $66.5+(13.75*63.7)+(5*172)-(6.78*21)=1659.99$ Kcal.
3. Sujeto 3: $66.5+(13.75*86)+(5*174)-(6.78*21)=1976$ Kcal
4. Sujeto 4: $66.5+(13.75*93)+(5*178)-(6.78*20)=2099.65$ Kcal
5. Sujeto 5: $66.5+(13.75*59.7)+(5*181)-(6.78*20)=1656.775$ Kcal
6. Sujeto 6: $66.5+(13.75*81.2)+(5*174)-(6.78*21)=1910.62$ Kcal
7. Sujeto 7: $66.5+(13.75*57.8)+(5*171)-(6.78*20)=1580.65$ Kcal
8. Sujeto 8: $66.5+(13.75*67.8)+(5*168)-(6.78*21)=1696.37$ Kcal
9. Sujeto 9: $66.5+(13.75*78)+(5*179)-(6.78*22)=1884.84$ Kcal

Este cálculo es del gasto energético en reposo de las personas durante todo el día, en cambio el metabolismo basal del método MET es el metabolismo basal por hora. Así que, realizando un cálculo del metabolismo basal más el gasto energético que se realizaría por 8 horas de jornada laboral, se encontró que en promedio el gasto energético diario de un albañil de 18 a 30 años que realiza bóveda es de cerca de las 3000 kcal al día. Tomando en cuenta que para personas en un rango de edad de 18 a 30 años, que están en constante actividad, se les recomienda consumir al día 3000 kcal (Rodríguez, 2021) se puede concluir que el gasto está un poco por encima del normal, además en promedio la actividad agrega 1000 kcal al gasto energético.

CONCLUSIONES

Después de la realización de este experimento, se pudo observar que los brazos tienen una carga física fuerte durante la realización de bóveda, lo cual representa un problema de lesiones y/o enfermedades físicas, así que la propuesta de realizar estas actividades con la ayuda de un exoesqueleto es beneficiosa, ya que no solo reduciría la carga que el brazo sufre, sino que además el trabajador puede realizar la actividad sin recibir el mismo desgaste

Esto se puede evaluar con los resultados de la fatiga muscular arrojadas por el software de *Open signals*, estas señales de los resultados se pueden usar como un buen comparativo al esfuerzo que se hace con el exoesqueleto, para de esta forma concluir si en realidad es una mejora considerable para esta actividad.

En cuanto al gasto energético, este no se encontró tan elevado como se esperaba, pero sí elevó un poco el que se obtiene en reposo total, representando una actividad que conlleva un esfuerzo y desgaste para la persona que la realiza.

REFERENCIAS

- MyFitnessPal. (s.f). *Calculadora de BMR, calculadora del índice del metabolismo basal*. <https://www.myfitnesspal.com/es/tools/bmr-calculator>
- Diego-Mas, J. A. (2015). *Cálculo de la tasa metabólica*. Universidad Politécnica de Valencia. <https://www.ergonautas.upv.es/herramientas/tasamet/tasamet.php>
- Diego-Mas, J. A. (s.f). *Software para la evaluación de la ergonomía Puestos de trabajo*. Universidad Politécnica de Valencia. <https://www.ergonautas.upv.es/ergoniza/app/index.html>
- Dufaug, A., Barthod, C., Goujon, L., y Marechal, L. (2020). New joint analysis of electromyography spectrum and amplitude-based methods towards real-time muscular fatigue evaluation during a simulated surgical procedure: A pilot analysis on the statistical significance. *Medical Engineering & Physics*, 79, 1–9. <https://doi.org/10.1016/J.MEDENGGPHY.2020.01.017>
- Eidos, C. (10 de julio de 2022). *Trastornos musculoesqueléticos: causas y cómo prevenirlos*. ClíkiSalud.net/ Fundación Carlos Slim: <https://www.clikisalud.net/salud-general-trastornos-musculoesqueléticos-causas-como-prevenirlos/>
- Falcone, T., Del Ferraro, S., Molinaro, V., Zollo, L. y Lenzuni, P. (2023). Estimation of the metabolic rate in the occupational field: a regression model using accelerometers. *International Journal of Industrial Ergonomics*, 96, 103454. <https://doi.org/10.1016/J.ERGON.2023.103454>

- García, A. K. (6 de agosto de 2018) *¿En qué trabajan los mexicanos?* El Economista: <https://www.eleconomista.com.mx/empresas/En-que-trabajan-los-mexicanos-20180806-0021.html>
- Gómez–Conesa, A. (2002). Factores posturales laborales de riesgo para la salud. *Fisioterapia*, 24 23–32. [https://doi.org/10.1016/S0211-5638\(01\)73015-5](https://doi.org/10.1016/S0211-5638(01)73015-5)
- Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales de España.(1995) NTP 323: *Determinación del metabolismo energético*. [Archivo PDF] https://www.insst.es/documents/94886/326827/ntp_323.pdf/04f2e840-4569-421a-acf4-37a9bfob8804
- Joel, H. (16 de mayo de 2020). *Estadísticas de los riesgos de trabajo en México - Servicios preventivos de seguridad y salud en el trabajo*. Servicios Preventivos de Seguridad y Salud en el Trabajo. <https://www.sepresst.com.mx/2019/10/13/estadisticas-de-los-riesgos-de-trabajo-en-mexico/>
- Laurent, R. (2010). *Disorders of skeletal muscle*. Musculoskeletal System 2 109–122. <https://doi.org/10.1016/B978-0-7020-3377-3.00008-1>
- Porto, J. P., y Gardey, A. (21 de agosto de 2017). *Bóveda - Qué es, definición y concepto*. Definición.de. <https://definicion.de/boveda/>
- Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo. (s.f.). Posturas de trabajo. <https://www.insst.es/materias/riesgos/riesgos-ergonomicos/carga-de-trabajo/posturas-de-trabajo>
- Rodríguez, Ó. (25 de abril de 2021). *Las calorías que debes ingerir al día según tu edad para adelgazar*. elconfidencial.com. https://www.elconfidencial.com/alma-corazon-vida/2021-04-25/cuanto-tas-calorias-ingerir-cada-dia-para-adelgazar_2689732/#:~:text=As%C3%AD%2C%20la%20recomendaci%C3%B3n%20para%20los,aquellos%20que%20son%20personas%20activas.
- Dirección General de Seguridad y Salud en el Trabajo. (02 de enero de 2018). Trabajo seguro. https://trabajoseguro.stps.gob.mx/bolo79/vinculos/notas_6.html
- Trejo, Y. (28 de octubre de 2022). Los 5 trabajos que más lesiones producen en México: cuáles son y cómo evitar tener un accidente. Diario AS: <https://mexico.as.com/actualidad/los-5-trabajos-que-mas-lesiones-producen-en-mexico-cuales-son-y-como-evitar-tener-un-accidente-n/>

Evaluación de la percepción de la carga de trabajo durante la simulación de las actividades de bovederos

MAXIMILIANO BARBA IBARRA

maximiliano.barba9337@alumnos.udg.mx

ANNY MUÑOZ ROMO

anny.munoz9616@alumnos.udg.mx

MARIO ALBERTO VILLEGAS ROMERO

alberto.villegas@academicos.udg.mx

RESUMEN

Se presentan los resultados de la percepción de la fatiga físico y mental que presentaron sujetos de prueba al realizar la simulación de las actividades que desarrollan los albañiles al construir techos de bóveda y, si esta puede llegar a generar un malestar físico mayor a corto, mediano o largo plazo. Para recabar información y analizarla se utilizaron los métodos NASA TLX, Swedish Occupational Fatigue Inventory (SOFI SM), y la Escala Borg para evaluar la percepción de la fatiga. Los cuales mostraron índices medios-altos de fatiga en los participantes, determinando un probable riesgo a la salud durante la ejecución de las actividades.

PALABRAS CLAVE

Bóveda (vault), fatiga (fatigue), percepción (perception), actividad manual (manual activity), riesgo (risk).

INTRODUCCIÓN

La construcción de bóveda es una actividad muy utilizada para la elaboración de casas o edificios y quienes ejecutan la obra se basan únicamente en los conocimientos heredados y su propia experiencia (Ángel, 2018), por lo que se han vuelto una parte arquitectónica representativa de la región Altos Norte de Jalisco, así como en diferentes localidades (ver figura 1).

Figura 1. Construcción tradicional de techo de bóveda



En la evaluación de riesgos se identifican cinco principales factores de riesgo asociados a los riesgos laborales; riesgos físicos, mecánicos, químicos, ergonómicos y riesgos psicosociales (Pozo Andrade, 2016), siendo este último no muy estudiado en el medio de la ingeniería lo cual representa una importante área de oportunidad para realizar análisis y proponer soluciones a los problemas que se presenten en dicha área. Dentro de la seguridad y la salud ocupacional, en las actividades propias de la construcción por lo regular no se llegan a tomar medidas preventivas enfocadas hacia el bienestar y salud mental de los trabajadores, en cuestiones como lo son el estrés y los riesgos a largo plazo con relación directa a la fatiga laboral.

Un aspecto relevante en la ejecución de cualquier trabajo manual es la fatiga física que se presenta por la ejecución de actividades manuales. Para Useche (2009),

la fatiga laboral es un fenómeno complejo y muy común en los ambientes de trabajo especialmente en aquellos que requieren de una alta carga física y en los que son utilizadas complicadas tecnologías que presentan al hombre máximas exigencias, obligándolo a trabajar más allá de sus posibilidades psicofisiológicas y en condiciones muchas veces nocivas. (89)

La fatiga física puede afectar todo el organismo y llegar a representar síntomas de enfermedades profesional a mediano o largo plazo. Si bien se esperaría que el nivel de esfuerzo requerido este equilibrado con las capacidades personales, sin embargo esto no siempre es así, ya que existen trabajos muy demandantes de esfuerzos físicos y no es posible lograr un equilibrio, lo cual conlleva a la fatiga laboral.

Cuando el trabajo exige el mantenimiento constante de un determinado grado de esfuerzo aparece la fatiga. Los síntomas de esta fatiga, que se siente durante el trabajo o enseguida después de haberlo finalizado, son: sensación de cansancio, somnolencia, alteraciones en la capacidad de atención, precisión de movimientos, y se traduce en variaciones del rendimiento, de la actividad, de los errores, etc. (Arquer, 1997)

Es común que los trabajadores de la construcción adopten posturas forzadas para la realización de sus actividades, ahora bien el construir un techo de bóveda implica que el trabajador se adapte a las condiciones del medio donde se encuentra laborando, lo cual es un riesgo, pues el estar en una misma posición durante un largo transcurso de tiempo, así como el tener que hacer esfuerzos en dicha postura puede ocasionar que su rendimiento baje y esto puede provocar al trabajador diferentes dolores musculares en los miembros de su cuerpo, así como que tienden a sentir pequeñas lesiones que con el paso del tiempo se agravan un poco más, lo que les ocasionará que no rindan en su trabajo laboral por un largo periodo de tiempo.

Existen diversos métodos objetivos para la evaluación global de las condiciones de trabajo que incluyen, normalmente, un apartado dedicado a la carga mental. Su objetivo es valorar aquellos factores presentes en el puesto de trabajo que pueden influir sobre la salud de los trabajadores, de manera que pueda determinarse sobre cuál de ellos debe actuarse para mejorar una situación de trabajo (Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo, [INSHT] s.f.)

La aportación ante la investigación es referente a la cantidad de fatiga que se puede llegar a tener y cómo la perciben las personas que se desempeñan día con día en esta labor de bóveda, así mismo en base a esta información determinar si hay algún riesgo de lesión prematura o bien se pudiera presentar en un futuro, poniendo en riesgo al trabajador causando problemas en las respectivas extremidades que son utilizadas para realizar dicha actividad ocasionando de esta manera, lesiones permanentes.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para abordar el análisis de la investigación y recabar datos un poco más específicos en cuanto a los estudios realizados, se hace necesario emplear los métodos NASA-TLX, SOFI (Inventario de Fatiga Ocupacional Sueco) y escala de Borg. Se utilizó una muestra a conveniencia de 10 participantes disponibles para el estudio, los cuales realizaron la simulación de los movimientos que realizan los trabajadores de la construcción durante la elaboración de techos de bóveda. A cada participante se le realizó una entrevista personalizada al terminar de ejecutar las actividades simuladas de construcción de un techo de bóveda; cada uno desarrolló un ciclo de trabajo considerando 3 variables; distancia de elaboración de bóveda, altura de la bóveda y uso de un soporte de apoyo.

MÉTODO NASA TLX

El método Nasa TLX es un procedimiento que se enfoca en la valoración multidimensional de 6 factores para evaluar los riesgos en base al trabajo elaborado referente a la carga física/mental para así aislar las causas y evaluarlas si son un factor de riesgo. (Nogareda, 2023)

Primero se percibe de donde proviene la carga de trabajo respecto a la tarea determinada en 6 dimensiones (exigencia mental, exigencia física, exigencia temporal, esfuerzo, rendimiento, nivel de frustración) y referente a estas dimensiones los participantes determinan el peso de cada una en la actividad. Una vez obtenido esto se determina el nivel de riesgo que puede tener la actividad.

MÉTODO SOFI-SM

El método SOFI-SM es un instrumento para la evaluación de la fatiga relacionada con cualquier trabajo laboral, ayudando así mismo a comprender el origen y desarrollo de los trastornos relacionados con el trabajo, que de igual manera ayuda a obtener resultados más específicos en cuanto respuestas fisiológicas, cognitivas, motoras y emocionales, abarcando de igual manera a cualquier rango de edad, así como, por otro lado tomando en cuenta aspectos personales de la persona, como lo que son sus medidas generales y peso. (Alcalá, 2015)

Con base a los datos obtenidos se realiza la actividad y se encuesta sobre el nivel de fatiga que percibieron tanto físico como mental. Una vez obtenido toda la información se hace un análisis con los promedios de los datos obtenidos.

ESCALA DE BORG.

También conocida como la escala de Esfuerzo Percibido, mide, como su nombre lo indica, la percepción de esfuerzo, la intensidad y volumen de la actividad física, por lo que es una buena alternativa para evaluar el nivel de exigencia en cada entrenamiento sobre todo cuando eres un deportista de alto nivel. (Equipo Editorial Siclo, 2021).

Esto así mismo ayuda a tomar en cuenta fácilmente si la persona es diestra o zurda lo que no hace que sea un problema pues se adapta precisamente a la parte de la percepción que tuvo la persona a la hora de realizar dicha actividad.

RESULTADOS

Ante los siguientes resultados se tiene que tener en cuenta que los participantes no contaban con las mismas capacidades físicas-mentales por lo tanto se muestran resultados de la percepción promedio obtenida de los participantes.

En dicho método SOFI-SM se toman como base los puntos de cansancio emocional y cansancio físico que forma parte de las afirmaciones que se espera escuchar con respecto a la actividad. Aquí previamente se toman los datos de la persona, dentro de ellos los principales que son de

importancia para la actividad, así como algunos extras, que pueden servir de ayuda en el análisis de esta misma; en ellos encontramos lo que es su edad, peso, y estatura, así como la dimensión de sus extremidades de la parte superior del cuerpo principalmente.

Para entender un poco más del trabajo que fue realizado, en la tabla 1 se muestran los datos de un participante, de la misma manera se recabó información y de cada uno de los participantes.

Tabla 1. Datos de medidas personales

DATOS A TOMAR EN CUENTA	
Turno	Matutino
Edad	21 años
Peso	63 kg
Estado civil	Soltero
Género	Masculino
Estatura	1,72
Altura del ojo	1,59
Altura del hombro	1,41
Altura del codo	1,1
Altura de la cadera	0,92
Altura de los nudillos	0,75
Altura de los dedos	0,65
Longitud del miembro superior	0,69
Longitud del hombro-sujeción	0,45

En la tabla 2 se muestra la información que proporcionó un participante, se puede observar el análisis sobre el estado de ánimo de la persona durante la realización interpretada de la elaboración de bóveda, mostrando datos del 1 al 10, según la escala en la que este se sintiera con respecto a la pregunta. A todos los participantes se les aplicó este cuestionario.

Tabla 2. Tabla de enunciados que describen el estado de ánimo habitual de la persona durante su trabajo laboral

ESCALA SOFI-SM											
EXPRESIONES	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Te sientes agotado la mayor parte del tiempo						●					
Te sientes extrnuado al terminar tu jornada laboral								●			
Cuando realizas tu trabajo sientes que respiras con dificultad				●							
Sientes papitaciones durate o después de tu jornada laboral				●							
Sientes que incrementa tu temperatura corporal mas de lo normal durante tu horario de trabajo	●										
Durante tus actividades laborales percivbes tus articulaciones rigidias o paralizadas	●										
Presencias entume-cimiento de piernas o brazos cuando trabajas					●						
Percibes dolor en alguna región del cuerpo mientas realizas tu jornada labora			●								

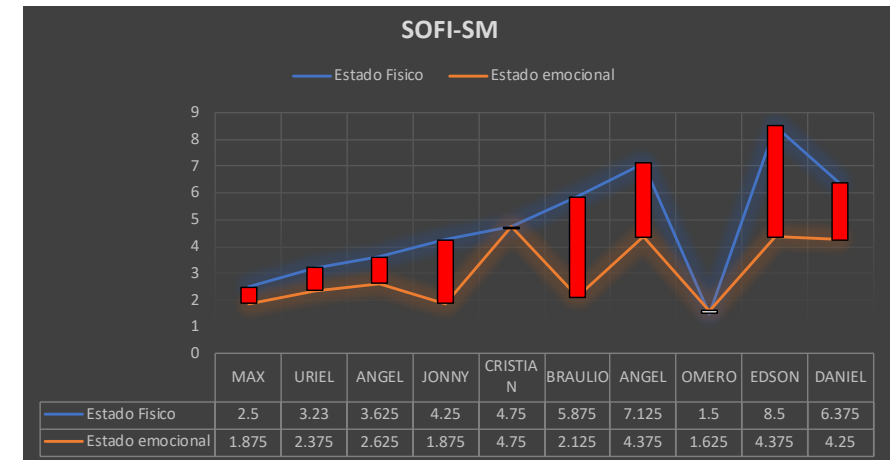
Para la tabla 3 que este método maneja, se muestran las preguntas que se les realizaron a los participantes sobre los sentimientos que son percibidos durante la realización del trabajo, tomando de igual manera escalas desde nunca hasta siempre, obteniendo un rango amplio con respecto a la elección del participante.

Tabla 3. Lista de enunciados que describen el estado emocional habitual de la persona durante su trabajo

Enunciado	Nunca/ algunas veces	Casi nunca/ Pocas veces	Algunas veces	Regular- mente/ Pocas veces	Bastantes veces	Casi siempre	Siempre
Se siente emocionalmente agotado por su trabajo		●					
Se siente cansado al final de la jornada de trabajo				●			
Se siente fatigado cuando se levanta por la mañana y tiene que ir a trabajar		●					
Siente que trabajar sus horas laborales le cansan			●				
Siente que su trabajo le esta desgastando				●			
Se siente con mucha energía en su trabajo					●		
Se siente frustrado en su trabajo		●					
Siente que en su trabajo maneja los problemas emocionales de forma adecuada					●		

Los resultados globales del análisis mediante la metodología SOFI-SM se muestran resumidos en la figura 2, donde se aprecia que en la mayor parte de los encuestados existe una diferencia nominal entre el estado físico y el emocional.

Figura 2. Resultados de percepción de fatiga mental y física



NASA-TLX:

Tras la encuesta sobre la percepción del esfuerzo se obtuvo que la actividad implica en su mayor parte el esfuerzo físico, el rendimiento y las exigencias temporales (ver figura 3).

Figura 3. Tabla demostrativa de percepción obtenida



Además, se analizó de manera individual el esfuerzo y percepción de la fatiga hechos a los participantes, en las figuras 4 y 5 se muestra un ejemplo de las respuestas dadas por un par de participantes.

Figura 4. Obtención de datos a participante

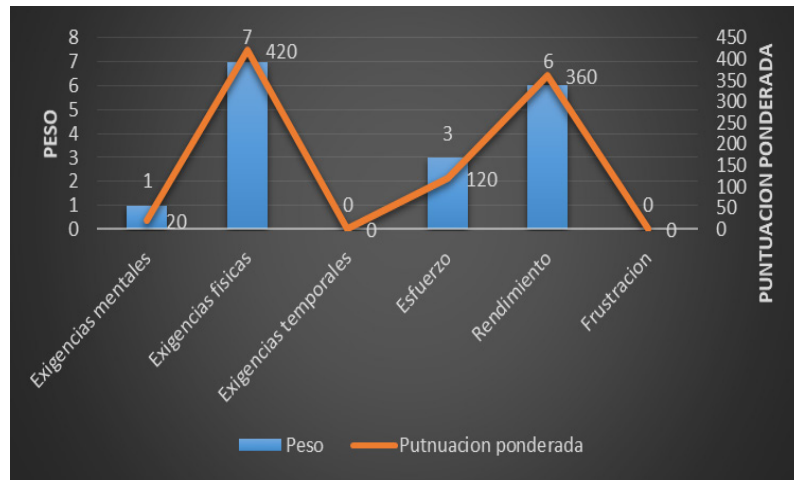
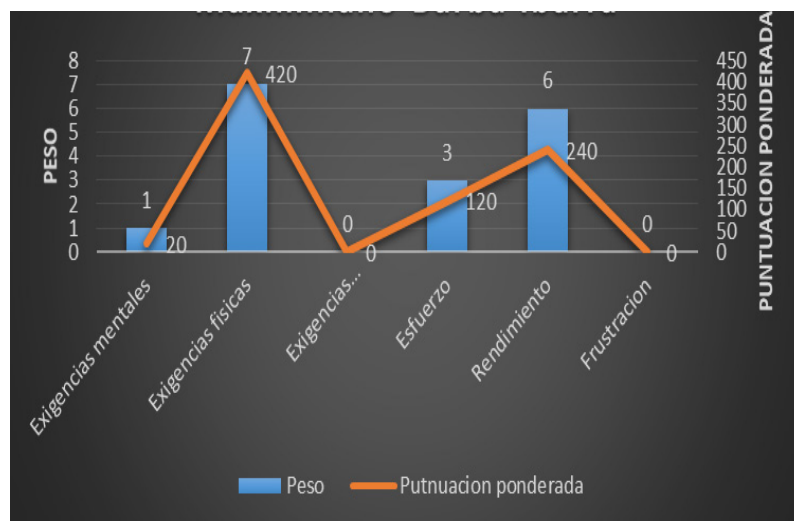


Figura 5. Obtención de datos a participante



Se percibió una correlación respecto a la percepción entre esfuerzo y fatiga con base a la actividad con muy poca dispersión en cuanto a los participantes selectos. Al realizar su análisis se notó un promedio total de puntuación ponderada de 1172 puntos. Sobre el nivel de riesgo, la puntuación de 500 puntos es “sin riesgo”; 750 puntos es “riesgo medio” y 1000 puntos es “riesgo alto”, como se ve en la tabla 4.

Tabla 4. Análisis de estudio NASA-TLX con respecto al riesgo observado

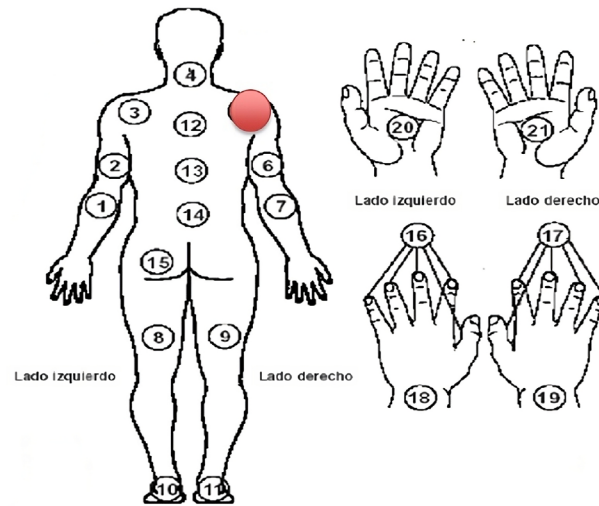
NASA - TLX	Nivel	Nivel de riesgo
500 punto o menos	1	El cargo posee una baja o moderada carga mental. El trabajador posee capacidad y experiencia para el cargo, y la organización provee de herramientas técnicas adecuadas que facilitan su trabajo,
Sobre los 500 puntos y por debajo de los 1000 puntos	2	El cargo posee una carga mental moderada o alta, en la mayoría de sus tareas. Los factores asociados a esos problemas son más bien de tipo organizacional, y modificables a partir de arreglos o soluciones ergonómicas.
Evaluación global sobre 1000 puntos y cuyos factores predominantes posean un caracter intrínseco	3	El cargo representa un riesgo medio para el trabajador si es que no se realiza una modificación al diseño del puesto, en un mediano plazo. El cargo tiene una gran carga mental asociada, y no es fácilmente modificable a través de arreglos o soluciones ergonómicas. Estos cargos requieren mayor descanso, o de otros arreglos organizacionales.

ESCALA DE BORG

En los resultados obtenidos a partir de la escala de Borg (figura 6), se hizo un pequeño análisis al término de dicha actividad a cada uno de los participantes independientemente de los demás y se pudo observar que las molestias más frecuentes y vistas eran en la parte del hombro derecho, ya que se realizaba un mayor esfuerzo y presión. El 90% de ellos era diestros y solo uno de ellos, formando el 10% era zurdo, obteniendo molestias en la parte contraria a la aquí señalada.

Figura 6. Representación corporal de puntos a tratar respecto a las molestias obtenidas

- 1 Codo izquierdo
- 2 Brazo izquierdo
- 3 Hombro izquierdo
- 4 Cuello
- 5 Hombro derecho
- 6 Brazo derecho
- 7 Codo derecho
- 8 Muslo trasero izquierdo
- 9 Muslo trasero derecho
- 10 Pie izquierdo
- 11 Pie derecho
- 12 Arriba de la espalda
- 13 En medio de la espalda
- 14 Abajo de la espalda
- 15 Gluteos o nalgas
- 16 Dedos de la mano izquierda
- 17 Dedos de la mano derecha
- 18 Muñeca izquierda
- 19 Muñeca derecha
- 20 Palma de la mano izquierda
- 21 Palma de la mano derecha
- 22 Otros, por favor sombree el area y describalo/s)



CONCLUSIONES

Gracias a los estudios y herramientas utilizadas se pudo analizar que en el método NASA TLX el índice de percepción promedio ponderada de 1172 de los sujetos analizados se concluyó que los puestos estudiados presentaban riesgo moderado y requerían modificaciones para evitar fatiga mental y desgaste prematuro. El método Borg indicó que las actividades generaban molestias físicas principalmente en el hombro derecho. El método SOFI mostró variabilidad en la percepción de fatiga física de 4.773 debido a diferencias individuales, mientras que la fatiga psicoemocional fue más uniforme entre los participantes obteniendo 3.025. De igual manera con la información que se obtuvo se aprecia que la actividad simulada presenta malestar entre los sujetos de prueba, por lo que vale la pena continuar con la investigación y realizar los análisis con trabajadores en condiciones reales, para obtener información de los miembros más afectados, las posturas más comunes y las posibles lesiones que causan el estar en esas tipos de posiciones para así proponer métodos o formas

que ayudan en gran parte el poder brindarle información al trabajador de cómo podría realizar dicha actividad sin que en un futuro le ocasionen molestias musculares o molestias colaterales.

REFERENCIAS

- Alcalá Rodríguez, M. V. (2015) *Aplicación de un PPA y su efectividad sobre los niveles de fatiga experimentados por los trabajadores* [Tesis Doctoral, Universidad Católica Andrés Bello] // [http://biblioteca2.ucab.edu.ve/anexos/biblioteca/marc/texto/AAT1211.pdf](http://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/http://biblioteca2.ucab.edu.ve/anexos/biblioteca/marc/texto/AAT1211.pdf)
- Hernández, L. (2018). *Documentación, análisis y caracterización de los procesos constructivos, geometrías y materiales empleados en la edificación de bóvedas en la región Altos Norte de Jalisco*. [Tesis de Maestría, Universidad Autónoma de Aguascalientes] Repositorio bibliográfico de la Universidad Autónoma de Aguascalientes. <http://bdigital.dgse.uaa.mx:8080/xmlui/handle/11317/1627>
- De Arquer I. y Nogareda, C. (1997). *NTP 544: Estimación de la carga mental de trabajo: el método NASA TLX*. [Archivo PDF] Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales de España.
- Equipo Editorial Siclo. (12 de diciembre de 2021). *Escala de Borg: Qué es y cómo aplicarla*. Siclo. <https://www.siclo.com/blog/escala-de-borg-que-es-y-como-aplicarla>
- Pozo Andrade, E. F y Rodas Tobar, M. I. (2016). Análisis comparativo entre Método Nasa tlx y el Método LEST de carga mental como factor de riesgo laboral en la agencia cuenca de la empresa The Tesalia Springs Company S.A, 2015 [Tesis de maestría, Universidad del Azuay] Universidad del Azuay. Repositorio Institucional <http://dspace.uazuay.edu.ec/handle/datos/6151>
- Useche, L. G. (2009) *Fatiga laboral* [Archivo PDF] <http://www.revistas.unal.edu.co/index.php/avenferm/article/view/16689/17585>

Habitación Inteligente

MARÍA JOSÉ GONZÁLEZ RANGEL
maria.grangel@alumnos.udg.mx

MANUEL DE JESÚS BAÑUELOS HIGUERA
manuel.bhiguera@alumnos.udg.mx;

TANIA AGLAE RAMÍREZ DEL REAL
tramirez@centrogeo.edu.mx

MIGUEL MORA GONZÁLEZ
miguel.mora@academicos.udg.mx

RESUMEN

La domótica ha sido utilizada para aumentar la comodidad en los hogares, simplificando labores cotidianas como encender dispositivos. Sin embargo, se puede mejorar aplicando Internet de las Cosas (IoT, por sus siglas en inglés) para manipular datos en pro del sistema. En el contexto de habitaciones de alquiler, este enfoque puede ser útil para mantener la habitación en condiciones adecuadas cuando esté vacía y preparada para su uso. El objetivo de este proyecto es utilizar IoT para el control inteligente de una habitación, integrando sensores y actuadores para la automatización y gestión de recursos. Se utilizará Matlab para la simulación del controlador, Python para obtener datos de páginas web de monitoreo del clima y C++ para la lectura y control de datos en un microcontrolador Arduino. Utilizando Python se analizarán documentos con formato HTML y XML, extracción de datos HTTP y comunicación con el Arduino. Además, se tendrá comunicación IoT con la página tutiempo.net, esto para obtener datos del clima que se combinará con los sensores del Arduino, aplicando controladores difusos con el fin de activar ventanas y aires acondicionados. El sistema se apagará automáticamente cuando se estabilice. Para el control de la iluminación se utilizará un sensor de presencia y una fotorresistencia. Como resultados, se obtiene el desempeño

pretendido del controlador difuso para mantener la temperatura deseada en la habitación, departamento o casa. El sistema permitirá mantener la habitación en buenas condiciones sin necesidad de mantenimiento.

PALABRAS CLAVE

Controlador difuso (fuzzy controller), Habitación inteligente (smart room), Domótica (home automation), Internet de las cosas (IoT, Internet of Things), Automatización (automation).

INTRODUCCIÓN

Este proyecto consiste en una habitación automatizada que integre el control difuso, lógica de programación e IoT, lo que permite la automatización y gestión eficiente de recursos como la iluminación, la humedad y el clima dentro de una habitación. La necesidad de mantener y mejorar las condiciones de una habitación de forma remota fue la razón detrás de este proyecto. Esto se vuelve especialmente importante en situaciones en las que el propietario no está presente.

Estos enfoques han demostrado su viabilidad y efectividad en la mejora de la comodidad y la eficiencia energética. Por ejemplo, comentan que el control difuso ha sido utilizado exitosamente en sistemas domóticos para regular la humedad y la temperatura en invernaderos, optimizando así la producción de cultivos (Lasso, et al., 2022).

El IoT ha demostrado ser beneficioso para la interconexión de dispositivos, lo que permite la recopilación y el intercambio de datos en tiempo real. Su uso en un sistema domótico permite una respuesta automática y control manual ante situaciones no cotidianas, lo que crea un ambiente confortable y agradable para los usuarios (Vázquez y Tinoco, 2018).

La creciente demanda de soluciones que permitan mantener un entorno habitacional ideal en situaciones de ausencia física, así como la eficiencia energética y la comodidad del usuario, explica el estado actual del problema. En este sentido, el trabajo propuesto tiene como objetivo proporcionar una solución completa, aprovechando las ventajas a corto, mediano y largo plazo. A corto plazo, la comodidad, la eficiencia y el control en tiempo real son los objetivos principales. A mediano plazo, se enfoca en evitar olores, luz natural y condiciones adversas. A largo plazo, se pretende evitar problemas como la proliferación de hongos y otros factores no deseados en la habitación,

contribuyendo a la calidad de vida del usuario y al mantenimiento del espacio habitacional. Existen diferentes plataformas que se dedican a la renta de espacios vacacionales, por ejemplo Airbnb, Booking, entre otras (Airbnb | Alojamientos Para Vacaciones, Cabañas, Casas En La Playa Y Más, s.f.; Booking.com: The Largest Selection of Hotels, Homes, and Vacation Rentals, s.f.). Por lo cual, los usuarios arrendadores de este tipo de plataformas tienden a tener más de una habitación en arrendamiento y por lo general en diferentes ciudades, lo que dificulta su manejo y su mantenimiento. Prado, et al, en 2008 realizaron un trabajo de domótica con un sistema de servicios web e IoT y una interfaz de nombre Ajax para controlar servicios domésticos (Prado et al., 2008).

Por lo tanto, el enfoque principal de esta investigación es desarrollar un sistema inteligente que no solo se adapte a las necesidades cambiantes de la habitación, sino que también mejore la experiencia del usuario, garantice la eficiencia energética y ayude a resolver los desafíos habitacionales, esto utilizando IoT en combinación con lógica difusa.

En la siguiente sección se presentan los materiales utilizados para realizar el prototipo o maqueta de la habitación, así como las metodologías de control que se emplearon para el mantenimiento de la misma. Después, se presenta la sección de resultados tanto físicos como de control difuso. Por último, se presentan las conclusiones del trabajo elaborado, así como su potencial trabajo a futuro.

MATERIALES Y MÉTODOS

Este proyecto se enfoca en la combinación de control difuso e IoT para lograr automatizar una habitación. Se utiliza un diseño que integra sensores y actuadores para la regulación de las condiciones ambientales, como la humedad, temperatura, e iluminación. Para lograrlo, se emplearon una serie de componentes y herramientas tecnológicas.

MATERIALES

- Foam Board (Tablero de espuma): Se emplea para construir la estructura de la habitación, incluyendo paredes y muebles. Este material se utiliza como base para montar y asegurar los componentes del proyecto.

- Servomotor: Se utiliza un servomotor para controlar la apertura y cierre de la ventana de la sala.
- LED: Se emplea un LED para la iluminación de la habitación, permitiendo controlar el encendido y apagado.
- Sensor PIR (Infrarrojo pasivo): Este sensor se utiliza para detectar la presencia de personas en la habitación y activar las luces automáticamente.
- Fotorresistencia: Se emplea para medir la intensidad de luz en el exterior de la habitación. Esto permitió saber cuándo era necesario encender las luces en el interior de la habitación en función de la cantidad de luz natural y la detección de presencia.
- Motor de 5v: Este actuador se utiliza para simular el funcionamiento de un ventilador o aire acondicionado.
- Sensor DHT11: Este sensor se utiliza para medir la temperatura y humedad relativa en la habitación.
- Pantalla LCD 1602A: Se incorpora una pantalla LCD para mostrar los datos obtenidos, como la temperatura, humedad relativa y otra información importante del entorno.
- Microcontrolador Arduino Mega: El Arduino Mega se utiliza como cerebro del sistema, coordinando la interacción entre los diferentes componentes y ejecutando la programación y controladores difusos realizados. Además, el Arduino Mega cuenta con suficientes pines de entrada y salida para conectar todos los sensores y actuadores necesarios en el sistema de control de la habitación.
- Material de apoyo: Se utiliza como material de apoyo cables de diferentes tipos para las conexiones, placa de conexiones (Proto-board), resistencias, fuente de alimentación externa de 5v, pinzas, soldadura, silicón, tijeras, regla, etc.

SOFTWARE

Se emplea Matlab para el diseño y simulación de los controladores difusos. La programación del microcontrolador Arduino se lleva a cabo utilizando el lenguaje C++, donde se desarrollan y cargan los controladores difusos. El lenguaje Python se utiliza para la descarga de datos climáticos de la página web. Por último, para realizar los diagramas electrónicos se utilizó el software Tinkercad®

MONTAJE DE HARDWARE

Para realizar la maqueta se utiliza Foam Board tratando de simular un cuarto-habitación, previo al montaje se diseñó un plano con base a las medidas de los sensores y actuadores utilizados para colocarlos de manera estratégica, esto se puede observar en la Figura 1.

Adicionalmente, para las conexiones de sensores y actuadores se realizaron diagramas representativos que se presentan en las Figuras 2 y 3. La conexión de los dispositivos se realizó con Arduino, siguiendo el enfoque presentado en la referencia (Vázquez & Tinoco, 2018).

SIMULACIONES Y PROGRAMACIÓN

Para desarrollar los controladores difusos, utilizamos el software Matlab®, que nos permite estructurar los términos y variables lingüísticas de cada entrada y salida del sistema. En la Figura 4, a la izquierda, se encuentra el controlador del ventilador, que toma la temperatura interior y exterior en grados centígrados como entradas y ajusta el voltaje para el encendido del ventilador como salida. A la derecha, se encuentra el controlador de la ventana, que toma la humedad interior y exterior en porcentaje como entradas y regula los grados de apertura o cierre de la ventana como salida.

Figura 1. Plano de la habitación con ubicación de sensores y actuadores

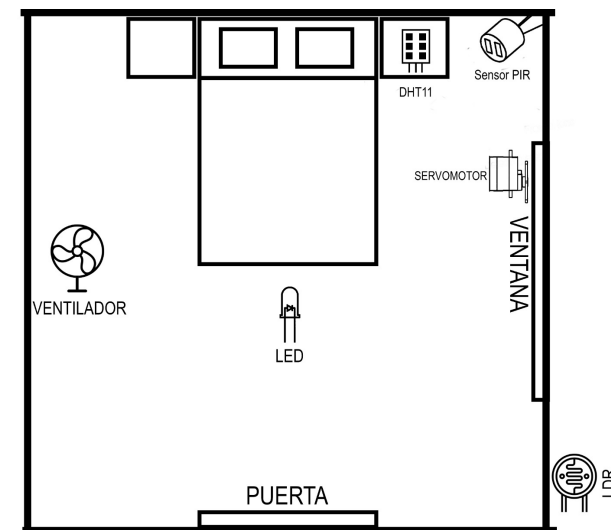


Figura 2. Diagrama de conexión de sensores y actuadores, utilizando Tinkercad

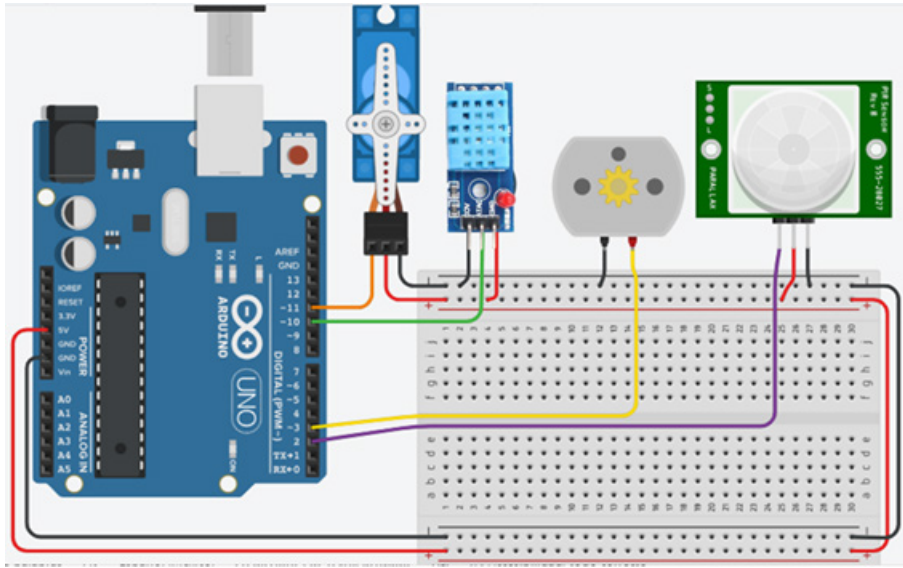


Figura 3. Diagrama de conexión pantalla LCD, utilizando Tinkercad

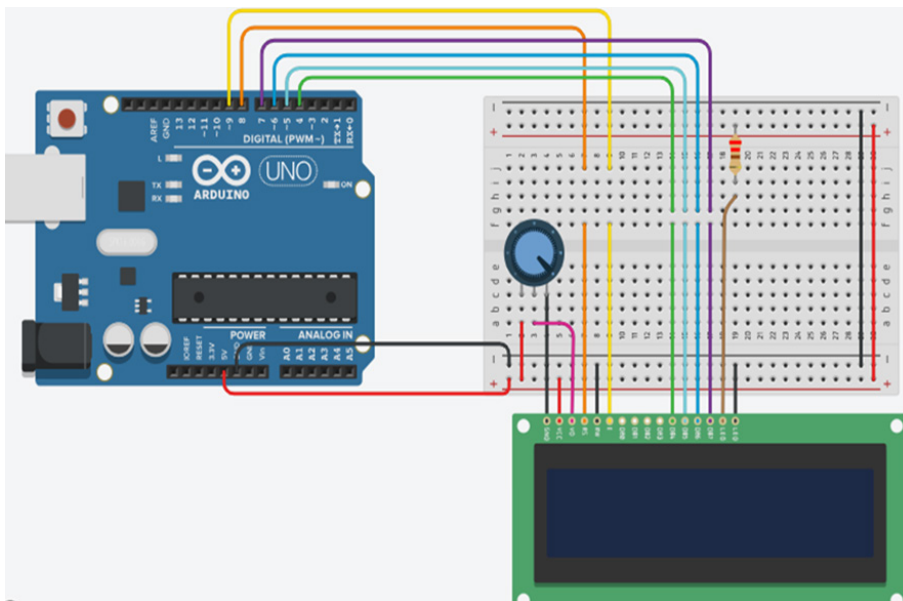
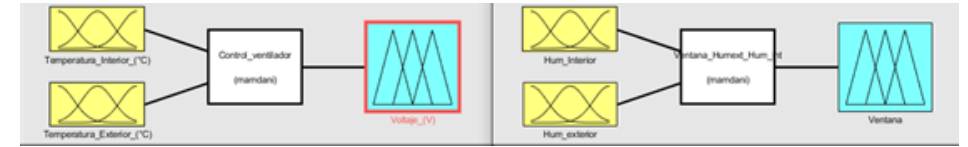


Figura 4. Controladores difusos en Matlab.



En la Figura 5 se presentan las variables y términos lingüísticos utilizados en cada controlador, se agregaron las suficientes funciones de pertenencia para cada entrada y salida de tal modo que se cubriera todo el rango y lograra funcionar de manera óptima.

La implementación del control difuso se basó en reglas heurísticas que ajustan automáticamente los parámetros de la habitación según datos de sensores e IoT, estas reglas se pueden observar en las Figuras 6 y 7 (Rodríguez-García et al., 2016). Esta metodología se inspira en el trabajo realizado en las referencias (Lasso, 2022; Rodríguez-García et al., 2016), aplicando un controlador difuso para regular humedad y temperatura.

Figura 5. Variables y términos lingüísticos.

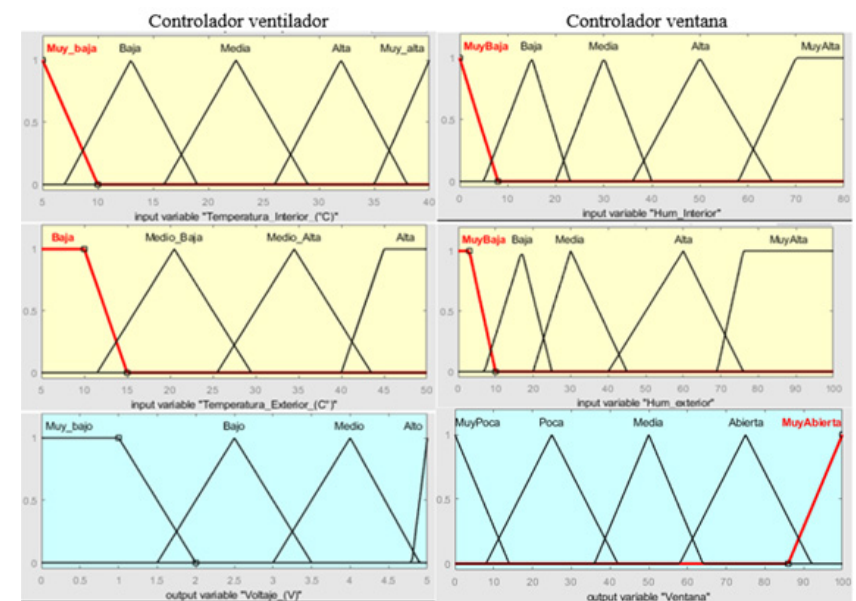


Figura 6. Reglas difusas de controlador difuso de ventilador
(Rodríguez-García et al., 2015).

1. If (Temperatura_Interior_(°C) is Muy_baja) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Baja) then (Voltaje_(V) is Muy_bajo) (1)
2. If (Temperatura_Interior_(°C) is Muy_baja) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Baja) then (Voltaje_(V) is Muy_bajo) (1)
3. If (Temperatura_Interior_(°C) is Muy_baja) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Alta) then (Voltaje_(V) is Muy_bajo) (1)
4. If (Temperatura_Interior_(°C) is Muy_baja) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Alta) then (Voltaje_(V) is Bajo) (1)
5. If (Temperatura_Interior_(°C) is Baja) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Baja) then (Voltaje_(V) is Muy_bajo) (1)
6. If (Temperatura_Interior_(°C) is Baja) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Baja) then (Voltaje_(V) is Muy_bajo) (1)
7. If (Temperatura_Interior_(°C) is Baja) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Alta) then (Voltaje_(V) is Bajo) (1)
8. If (Temperatura_Interior_(°C) is Baja) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Alta) then (Voltaje_(V) is Bajo) (1)
9. If (Temperatura_Interior_(°C) is Media) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Baja) then (Voltaje_(V) is Bajo) (1)
10. If (Temperatura_Interior_(°C) is Media) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Baja) then (Voltaje_(V) is Medio) (1)
11. If (Temperatura_Interior_(°C) is Media) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Alta) then (Voltaje_(V) is Medio) (1)
12. If (Temperatura_Interior_(°C) is Media) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Alta) then (Voltaje_(V) is Alto) (1)
13. If (Temperatura_Interior_(°C) is Alta) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Baja) then (Voltaje_(V) is Medio) (1)
14. If (Temperatura_Interior_(°C) is Alta) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Baja) then (Voltaje_(V) is Alto) (1)
15. If (Temperatura_Interior_(°C) is Alta) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Alta) then (Voltaje_(V) is Alto) (1)
16. If (Temperatura_Interior_(°C) is Alta) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Alta) then (Voltaje_(V) is Alto) (1)
17. If (Temperatura_Interior_(°C) is Muy_alta) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Baja) then (Voltaje_(V) is Alto) (1)
18. If (Temperatura_Interior_(°C) is Muy_alta) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Baja) then (Voltaje_(V) is Alto) (1)
19. If (Temperatura_Interior_(°C) is Muy_alta) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Medio_Alta) then (Voltaje_(V) is Alto) (1)
20. If (Temperatura_Interior_(°C) is Muy_alta) and (Temperatura_Exterior_(C°) is Alta) then (Voltaje_(V) is Alto) (1)

Para la programación en Python se importan librerías y módulos, incluyendo “BeautifulSoup” para el análisis HTML, “requests” para hacer solicitudes web, “serial” para comunicación serie con Arduino®, “struct” para empaquetar datos binarios, “sys” para interacción con el sistema y “time” para gestionar el tiempo. Una vez implementadas las librerías se realiza un raspado web a la página “tutiempo” para la extracción de datos meteorológicos, para posterior procesar esos datos y empaquetarlos para enviarlos a través del puerto serial a Arduino®.

Para la programación en Arduino®, el código se organiza en varias secciones, que incluyen la inclusión de librerías. Estas librerías permiten habilitar funciones específicas para el control de sensores y actuadores. Dado que nuestro programa implica el uso de controladores difusos, es necesario agregar la librería "Fuzzy.h", ya que las capacidades básicas de Arduino® no incluyen soporte para lógica difusa.

Una vez que hemos agregado las librerías, procedemos a definir los pines a los cuales se conectarán los sensores y actuadores, teniendo en cuenta si se trata de datos analógicos o digitales. Luego, continuamos creando estructuras Fuzzy. Debido a que tenemos dos controladores, la creación de las estructuras de ambos será análoga, con la diferencia de que los nombres y los valores de las variables serán distintos, además

deberemos asociar las entradas y salidas a cada estructura Fuzzy de acuerdo con las simulaciones realizadas en Matlab®. Un fragmento de código que ejemplifica lo mencionado se presenta en la Figura 8.

Figura 7. Reglas difusas del controlador difuso de la ventana
(Rodríguez-García et al., 2015).

1. If (Hum_Interior is MuyBaja) and (Hum_exterior is MuyBaja) then (Ventana is MuyPoca) (1)
2. If (Hum_Interior is MuyBaja) and (Hum_exterior is Baja) then (Ventana is MuyPoca) (1)
3. If (Hum_Interior is MuyBaja) and (Hum_exterior is Media) then (Ventana is MuyPoca) (1)
4. If (Hum_Interior is MuyBaja) and (Hum_exterior is Alta) then (Ventana is MuyPoca) (1)
5. If (Hum_Interior is MuyBaja) and (Hum_exterior is MuyAlta) then (Ventana is MuyPoca) (1)
6. If (Hum_Interior is Baja) and (Hum_exterior is MuyBaja) then (Ventana is Poca) (1)
7. If (Hum_Interior is Baja) and (Hum_exterior is Baja) then (Ventana is Media) (1)
8. If (Hum_Interior is Baja) and (Hum_exterior is Media) then (Ventana is Poca) (1)
9. If (Hum_Interior is Baja) and (Hum_exterior is Alta) then (Ventana is MuyPoca) (1)
10. If (Hum_Interior is Baja) and (Hum_exterior is MuyAlta) then (Ventana is MuyPoca) (1)
11. If (Hum_Interior is Media) and (Hum_exterior is MuyBaja) then (Ventana is MuyAbierta) (1)
12. If (Hum_Interior is Media) and (Hum_exterior is Baja) then (Ventana is Abierta) (1)
13. If (Hum_Interior is Media) and (Hum_exterior is Media) then (Ventana is Media) (1)
14. If (Hum_Interior is Media) and (Hum_exterior is Alta) then (Ventana is Poca) (1)
15. If (Hum_Interior is Media) and (Hum_exterior is MuyAlta) then (Ventana is MuyPoca) (1)
16. If (Hum_Interior is Alta) and (Hum_exterior is MuyBaja) then (Ventana is MuyAbierta) (1)
17. If (Hum_Interior is Alta) and (Hum_exterior is Baja) then (Ventana is MuyAbierta) (1)
18. If (Hum_Interior is Alta) and (Hum_exterior is Media) then (Ventana is Abierta) (1)
19. If (Hum_Interior is Alta) and (Hum_exterior is Alta) then (Ventana is Poca) (1)
20. If (Hum_Interior is Alta) and (Hum_exterior is MuyAlta) then (Ventana is MuyPoca) (1)
21. If (Hum_Interior is MuyAlta) and (Hum_exterior is MuyBaja) then (Ventana is MuyAbierta) (1)
22. If (Hum_Interior is MuyAlta) and (Hum_exterior is Baja) then (Ventana is MuyAbierta) (1)
23. If (Hum_Interior is MuyAlta) and (Hum_exterior is Media) then (Ventana is MuyAbierta) (1)
24. If (Hum_Interior is MuyAlta) and (Hum_exterior is Alta) then (Ventana is Poca) (1)
25. If (Hum_Interior is MuyAlta) and (Hum_exterior is MuyAlta) then (Ventana is MuyPoca) (1)

Continuando con la configuración inicial (*void setup*) primeramente inicializamos la velocidad de comunicación serial en 115200 esto debido a que obtendremos paquetes de datos de la página web “tutiempo” que procesamos en Python, después asignamos cada pin como entrada o salida de acuerdo con los requerimientos.

Una vez terminado lo anterior se asignan funciones de pertenencia a cada entrada y salida de los controladores. En la Figura 9 se puede observar un fragmento de código de este proceso.

Ya que tenemos las funciones de pertenencia procedemos a crear la regla difusa con su causa y consecuencia para posteriormente agruparlas y formar cada regla de ambos controladores, podemos ver cómo se conforman en la Figura 10.

Después de haber terminado las configuraciones de los controladores difusos se procede a entrar al bucle principal (void loop), el cual estará realizando un conjunto de tareas que incluyen la lectura de datos de los sensores y el envío de datos obtenido de los controladores para el control de los actuadores.

Figura 8. Creación de estructura de datos Fuzzy.

```
Fuzzy *fuzzy1 = new Fuzzy();
// Entrada 1: Temperatura interior
FuzzySet *muyb_ti = new FuzzySet(5, 5, 5, 10);
FuzzySet *baja_ti = new FuzzySet(7, 13, 13, 19);
FuzzySet *media_ti = new FuzzySet(16, 22.5, 22.5, 29);
FuzzySet *alta_ti = new FuzzySet(26, 32, 32, 38);
FuzzySet *muya_ti = new FuzzySet(35, 40, 40, 40);
```

Figura 9. Asignación de funciones de pertenencia.

```
temperaturaInt->addFuzzySet(muyb_ti);
temperaturaInt->addFuzzySet(baja_ti);
temperaturaInt->addFuzzySet(media_ti);
temperaturaInt->addFuzzySet(alta_ti);
temperaturaInt->addFuzzySet(muya_ti);
fuzzy1->addFuzzyInput(temperaturaInt);
```

Figura 10. Creación de reglas difusas.

```
//Causa 1
FuzzyRuleAntecedent *ifTemperaturaIntmuybAndTemperaturaExtbaja = new FuzzyRuleAntecedent();
ifTemperaturaIntmuybAndTemperaturaExtbaja->joinWithAND(muyb_ti, baja_te);
// Consecuencia 1
FuzzyRuleConsequent *thenvoltajemuyb = new FuzzyRuleConsequent();
thenvoltajemuyb->addOutput(muyb_v);
// Regla 1
FuzzyRule *regla1 = new FuzzyRule(1, ifTemperaturaIntmuybAndTemperaturaExtbaja, thenvoltajemuyb);
fuzzy1->addFuzzyRule(regla1);
```

RESULTADOS

En el proyecto, se logró diseñar e implementar en maqueta, un sistema de control difuso para automatizar una habitación de renta diaria, llevándola a un proyecto futuro de habitación inteligente. Contribuyendo al control de parámetros físicos como la humedad, temperatura y la iluminación de la habitación, utilizando tecnología en software (control de datos con IoT) y hardware (control de datos con sensores y microcontrolador), logrando controlar automáticamente la apertura/cierre de la ventana, el encendido/apagado del ventilador y/o la iluminación.

De acuerdo con la simulación de los controladores en Matlab, podemos observar una gran precisión en el controlador de Arduino®. Esto se refleja en una salida de 3.96V en el controlador del ventilador (Figura 11) equivalente a un valor de 201 en PWM. En la misma figura, también se observa la salida de la apertura de la ventana, la cual es de 75°. Además, en la Figura 12 se observa que se obtiene la misma salida. En la Figura 13 se observa una fotografía del interior de la maqueta, así como en la Figura 14 se muestra la pantalla o *display* de resultados, los cuales pueden estar dentro de la habitación para monitoreo de los usuarios o de manera remota con el propietario de la misma.

Figura 11. Controlador del ventilador con entradas interior 26°C y exterior 28°C.

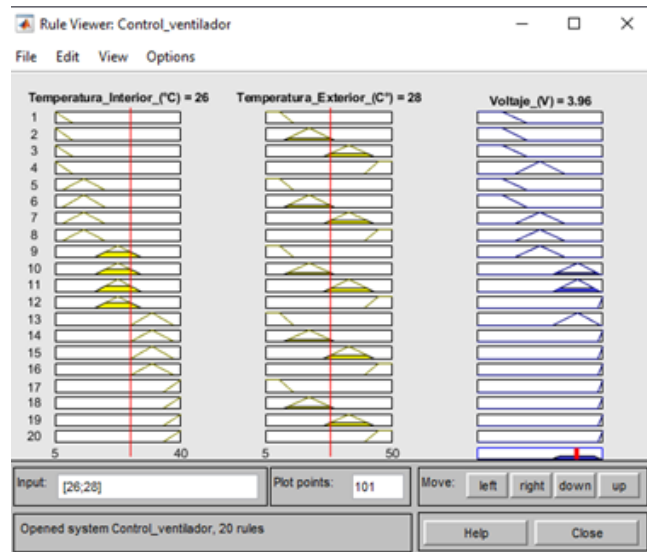


Figura 12. Controlador de la ventana con entradas de humedad interior 24 % y exterior 10 %.

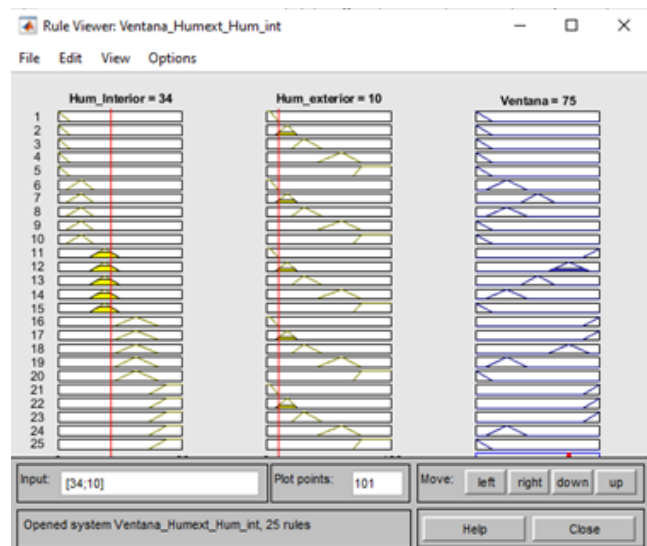


Figura 13. Maqueta finalizada. El LED se colocó en la tapa de la maqueta, así como la fotorresistencia fuera de la maqueta, por lo cual no se ven en la fotografía

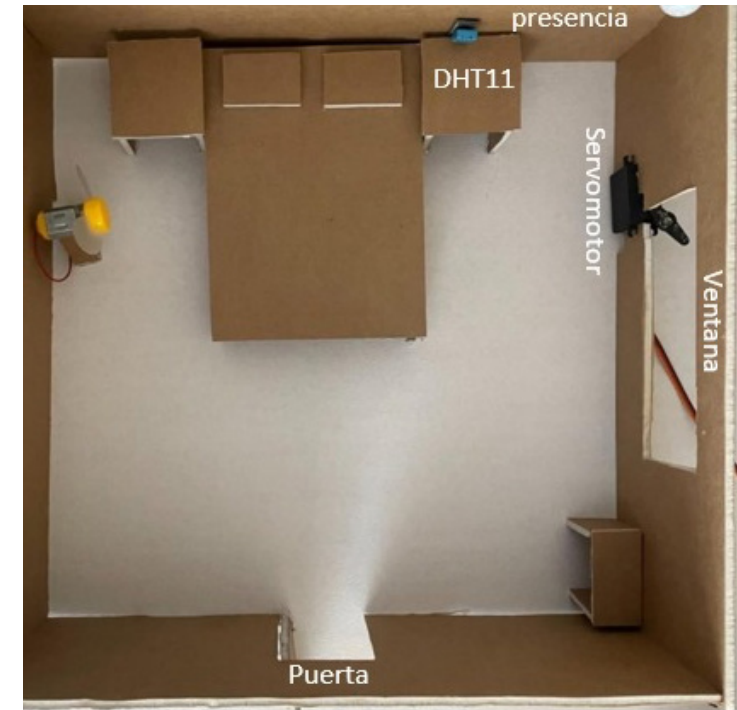


Figura 14. Resultados en pantalla LCD.



CONCLUSIONES

Recapitular las ideas y descubrimientos más importante, así como la vinculación con el programa educativo y propuesta futuras para abordar el tema de estudio.

En conclusión, este proyecto de una habitación inteligente ha demostrado ser una solución para mantener la habitación en buenas condiciones en todo momento. Por medio de control difuso e IoT se logró automatizar elementos clave como la apertura de la ventana y la velocidad del ventilador/aire acondicionado.

Tras concluir esta propuesta, se obtuvieron resultados altamente satisfactorios. El control de la habitación inteligente ha demostrado ser capaz de regular de manera eficiente las condiciones ambientales, evitando problemas como el exceso de humedad, calor acumulado, entre otros.

La importancia de aplicar este proyecto radica en mejorar la calidad y las condiciones de la habitación para que la estancia de los usuarios sea cómoda y satisfactoria. Además, al contar con la automatización de la habitación, se eliminan las preocupaciones relacionadas con el mantenimiento y el control manual por parte del propietario.

Esta investigación no solo refuerza la comprensión de conceptos relacionados con el control difuso, IoT y automatización doméstica, sino que también resalta la pertinencia de aplicar estos conocimientos en la vida cotidiana. Al integrar estos conceptos en el programa educativo, se fomenta una comprensión profunda de la tecnología que impulsa el futuro de la vivienda inteligente.

Como trabajo a futuro se pretende incluir la exploración de posibilidades para integrar una mayor cantidad de sensores en la habitación inteligente, lo que permitiría una optimización más completa de las condiciones ambientales. Además, se considera el desarrollo de una aplicación que permita a los propietarios cargar y monitorear los datos generados por el controlador, mejorando la eficiencia en la supervisión y el mantenimiento de las habitaciones inteligentes.

REFERENCIAS

- Airbnb. (s.f). Alojamientos para vacaciones, cabañas, casas en la playa y más. <https://www.airbnb.mx/>
- Booking. (s.f). The largest selection of hotels, homes, and vacation rentals. <https://www.booking.com/>
- Lasso Bittner, D. (2022). *Control difuso de temperatura y humedad de un invernadero en la comunidad José Paineicura Hueñalihuen* [Memoria para optar al Título de Ingeniera Civil Eléctrica, Universidad de Chile]. <https://repositorio.uchile.cl/handle/2250/187634>
- Pardo, M.E., Strack, G.E. y Martínez, D.C. (2008). *A domotic system with remote access based on web services*. *Journal of Computer Science and Technology*, 8(2), 91–96. <https://doaj.org/article/9032260a591b4545bac4d3837778abca>
- Rodríguez, D., Piedra, J. A. y Iribarne, L. (2015). *Adaptive domotic system in green buildings*. *IIAI International Conference on Advanced Applied Informatics 4* 593-598 <https://doi.org/10.1109/iiiai-aa.2015.281>
- Vázquez Fernández, J. A. y Tinoco Varela, D. (2018). Desarrollo de un sistema domótico con controlador difuso y controlador manual, implementado en LabView y arduino IDE. *Computing Science*, 147(6), 249-264. <https://doi.org/10.13053/racs-147-6-19>

Explorando la Ciencia de Datos: una mirada sólida desde la literatura, algoritmos y reflexiones

SADAN JOSUÉ LÓPEZ MORALES
sadan.lopez@alumnos.udg.mx

MARIO IGNACIO GONZÁLEZ SILVA
mario.gonzalezs@academicos.udg.mx

RICARDO GONZÁLEZ SILVA
ricardo.gsilva@academicos.udg.mx

RESUMEN

En este trabajo se presenta una reflexión integral de algunos aspectos fundamentales de la Ciencia de Datos desde tres perspectivas; la primera es mediante la obtención de un libro y la bibliografía que fundamenta todos los métodos de la Ciencia de Datos y sus scripts. La segunda consiste en el estudio del algoritmo de procesamiento de lenguaje natural y algoritmo de clasificación y capacitaciones diversas en programación así como la aplicación y mejora de algunos códigos. La tercera es la reflexión en forma de preguntas sobre la Ciencia de Datos.

PALABRAS CLAVE

Ciencia de Datos (Data Science), Big Data, Análisis de Datos (data analysis), Dashboard (Panel), Procesamiento del Lenguaje Natural (Natural Language Processing).

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, nos encontramos inmersos en una era caracterizada por el Big Data, la Ciencia de Datos y la Inteligencia Artificial. El crecimiento exponencial de los datos —también conocido como "avalancha de datos"— ha despertado un gran interés y expectación al tiempo que plantea desafíos significativos y abre oportunidades para la innovación y el desarrollo

económico (Hey y Trefethen, 2003). Este fenómeno ha captado la atención de grandes empresas enfocadas en los datos, así como de importantes instituciones gubernamentales y académicas. Ejemplos notables incluyen proyectos centrados en datos en Google, Facebook e IBM, así como iniciativas estratégicas en las Naciones Unidas (UN, 2010), la Unión Europea (Horizon, 2014) y China (China Government, 2015).

El reconocimiento de los desafíos, oportunidades y valores significativos del Big Data está transformando fundamentalmente los campos científicos y de ingeniería orientados a los datos tradicionales. También está transformando aquellos dominios de ingeniería de datos no tradicionales, como las ciencias sociales, los negocios y la gestión (Chen et al., 2012; Chris Yiu, 2012; Khan et al., 2014; Labrinidis y Jagadish, 2012).

Esta tendencia, ha generado un nuevo debate en torno al descubrimiento científico intensivo en datos, que se ha denominado el "cuarto paradigma de la ciencia". Este nuevo enfoque unifica el experimento, la teoría y la computación, abarcando la ciencia empírica, teórica y computacional (Hey et al., 2009; Jim Gray, 2007). Los datos son considerados como el nuevo "Intel Inside" o el nuevo petróleo y activo estratégico. Asimismo, impulsan e incluso determinan el futuro de la ciencia, la tecnología, la economía y posiblemente todo en nuestro mundo hoy y mañana (O'Reilly, 2005).

En Sydney en 2005, varios representantes de importantes proveedores de software de análisis de datos plantearon una pregunta crítica: la ciencia de la información ha existido durante mucho tiempo, ¿por qué necesitamos la ciencia de datos? ¿qué es la ciencia de datos? ¿es la ciencia de datos vino viejo en botellas nuevas? Estas preguntas han generado discusiones fundamentales en la comunidad, que incluyen la definición de la ciencia de datos y si es simplemente una versión actualizada de conceptos antiguos. La ciencia de datos y temas relacionados se han convertido en temas principales en conferencias sobre estadísticas, minería de datos, aprendizaje automático y —más recientemente— en el ámbito del Big Data, el análisis avanzado y la ciencia de datos. Temas como los desafíos en la ciencia de datos, el descubrimiento impulsado por datos y la ciencia basada en datos se discuten con frecuencia y generan un amplio y creciente debate (Agarwal y Dhar, 2014; Mike Loukides, 2010). Estas preguntas se plantean principalmente desde la perspectiva de la investigación y el desarrollo disciplinario, aunque existen otras cuestiones importantes

como las relacionadas con la economía y la competencia de los datos, que reciben menos atención en las conferencias mencionadas anteriormente.

Un factor fundamental que ha generado las preguntas anteriores y muchas otras son la exploración de desafíos y oportunidades nuevos o más complejos en el campo de la ciencia e ingeniería de datos (Cao, 2010; Jagadish et al., 2014). Estos desafíos y oportunidades se aplican tanto a los campos existentes, como la Estadística, las Matemáticas y la Inteligencia Artificial, como a otros dominios relevantes que aún no han sido abordados o no han sido considerados de manera adecuada con las metodologías, teorías, sistemas, herramientas, aplicaciones y tecnología.

Se está reconociendo cada vez más el potencial de la ciencia y el análisis de datos para impulsar la teoría, la economía y el desarrollo profesional basados en datos. Esto involucra no sólo disciplinas fundamentales como la computación, la informática y la estadística, sino también campos más amplios, como los negocios, las ciencias sociales y las ciencias médicas y de la salud (Cao, 2020).

Enfocándonos en la ciencia de datos, es evidente que sólo unos pocos artículos y referencias han abordado su historia y contenido de manera exhaustiva, como los trabajos de (Donoho, 2017; Gil Press, 2013). Donoho ofrece una revisión exhaustiva de la ciencia de datos, centrándose en su evolución a partir de la Estadística. En el libro de Cao (Cao, 2019) considera la profesión y educación en ciencia de datos además de la comprensión de la ciencia de datos.

MATERIALES Y MÉTODOS

MATERIALES

- Banco de libros sobre Ciencia de Datos tanto digital como en físico.
- Banco de artículos sobre Ciencia de Datos.
- Laboratorio de Modelación Matemática y Física Teórica.
- Lenguaje de programación Python.
- Uso del framework "Visual Studio", para programar en Python
- Plataformas de capacitación como Coursera y otros.
- Software XMind (XMind Ltd., 2007).

MÉTODOS:*Revisión bibliográfica:*

1. Identificar y recopilar literatura relevante sobre Ciencia de Datos, incluyendo libros, artículos de investigación y recursos en línea.
2. Explorar las bases conceptuales, teóricas y metodológicas de los diferentes métodos de análisis de datos, así como las referencias fidedignas asociadas a cada uno.
3. Investigar cómo se aplican los métodos de la Ciencia de Datos de manera profunda y con conocimiento de causa, examinando estudios de casos y ejemplos prácticos.

Sesiones de colaboración:

1. Realizar sesiones de colaboración conjunta para discutir y compartir ideas sobre los temas identificados durante la revisión bibliográfica.
2. Fomentar la inteligencia colectiva mediante la participación de investigadores y expertos en el campo de la Ciencia de Datos.

Autocapacitación y formación complementaria:

1. Realizar autocapacitaciones en plataformas en línea como Coursera, utilizar herramientas como Notion, Obsidian (Roy Thomas et. al 2020) y Tableau para fortalecer habilidades técnicas y analíticas.
2. Participar en sesiones de capacitación en pensamiento radial utilizando software como XMind para mejorar la capacidad de organización y síntesis de la información.

Análisis y síntesis:

1. Analizar críticamente la información recopilada para identificar las bases teóricas, metodológicas, tecnológicas y filosóficas que deben incluirse en un libro de Ciencia de Datos.
2. Sintetizar los hallazgos para establecer una base sólida para la elaboración del libro, organizando la información de manera clara y coherente.

Aplicación práctica:

1. Utilizar el método del artículo “preguntario LANCOSPRU” (González Silva R. A. y Abrica Jacinto N.L., 2023) para plantear preguntas clave para reflexionar sobre los métodos de la Ciencia de Datos.
2. Experimentar con los algoritmos de regresión lineal, clasificación, clusterización y análisis de sentimientos y comparar su grado de efectividad.

RESULTADOS

Los resultados obtenidos en el verano de investigación fueron:

BASES BIBLIOGRÁFICAS SOBRE CIENCIA DE DATOS

En el desarrollo del proyecto de investigación en Ciencia de Datos, se llevó a cabo una búsqueda exhaustiva y selección de libros relevantes sobre este tema, que cumplieran con criterios específicos. Estos criterios incluyeron la presencia de ecuaciones, fórmulas, referencias detalladas, explicación de conceptos y la viabilidad de acceso a los códigos. Después de una evaluación minuciosa, se seleccionó el libro *Introduction to Data Science* de Laura y Santi (Igual y Seguí, 2017), que se destacó por su amplio contenido de técnicas y algoritmos para el análisis de datos, así como por tener algunas bases teóricas. Una vez elegido este libro como referencia principal, se procedió a crear un banco bibliográfico que incluía una variedad de artículos y libros complementarios que fundamentaran los temas tratados en el texto seleccionado. Este banco bibliográfico se constituyó como una fuente adicional de información para enriquecer el estudio y ampliar la comprensión de los conceptos abordados en el proyecto.

Del libro *Introduction to Data Science*, se obtuvo los scripts de un repositorio de GitHub que se trabajan en Notebooks del lenguaje de programación Python y procedió con la etapa de depuración, mejora y actualización de los códigos relacionados con algunos de los temas tratados en el texto. Esta fase implicó revisar líneas de código, identificar posibles errores o áreas de mejora y actualizar según las últimas prácticas y herramientas disponibles. Simultáneamente, se abordó el planteamiento y análisis de las aplicaciones de los códigos para la regresión lineal,

clasificación, clusterización y análisis de sentimientos. Se realizaron sesiones de trabajo dedicadas a comprender en profundidad algunos algoritmos y su aplicación práctica en diferentes escenarios. Se analizaron conjuntamente los resultados obtenidos de las implementaciones y se discutieron posibles mejoras o ajustes necesarios.

PRODUCTOS EN CIENCIA DE DATOS

Los códigos de los siguientes algoritmos se encuentran en el repositorio GitHub

Algoritmos de Procesamiento del Lenguaje Natural:

Análisis de sentimientos

El procesamiento del lenguaje natural es una rama de la inteligencia artificial que se centra en la interacción entre las computadoras y el lenguaje humano, su objetivo principal es permitir que las computadoras comprendan, interpreten y generen texto de manera similar a como lo haría un humano.

Se desarrolló un script para analizar los sentimientos ya sea en textos, mails, canciones o cualquier tipo de texto. Para ello se tomó un conjunto de datos proporcionado por el repositorio de GitHub del libro de Laura y Santi, el cual contiene los registros de diferentes tweets así como la clasificación del sentimiento que transmite, este conjunto es utilizado para entrenar los modelos que se muestran a continuación y una vez entrenados poner a prueba su precisión analizando un fragmento de la canción Halo de Beyonce y así determinar cual de ellos es más óptimo.

La estructura de este algoritmo se puede explicar en los siguientes pasos:

1. Procesamiento de datos: el primer paso es preparar los datos para su análisis, lo que implica la limpieza de los datos, eliminando los signos de puntuación, números, palabras irrelevantes (*stop words*) y la normalización del texto, esta implica convertir todas las letras en minúsculas, identificando los usuarios y emojis.
2. Representación del texto: en este paso el texto se convierte en una representación numérica para que el algoritmo lo pueda entender. Estas técnicas asignan un valor numérico a cada palabra del texto, creando vectores de características que representan el texto.

3. Entrenamiento del modelo: se entrena un modelo de aprendizaje automático mediante una parte del conjunto de datos, estos se encuentran etiquetados, esto consiste en que se encuentran clasificados según el sentimiento asociado (positivo, negativo o neutral). En el script se ingresaron tres modelos que se encuentran disponibles en las librerías de Python:
 - Modelo de Bernoulli: se utiliza para predecir resultados binarios en situaciones donde solo existen dos posibles resultados, sí/no o éxito/fracaso.
 - Modelo Lineal SVC (Support Vector Classifier): se usa en aprendizaje supervisado para clasificar datos. Es efectivo para encontrar el resultado óptimo que separa diferentes clases en un espacio de características, maximizando el margen de relación entre ellas.
 - Modelo de Regresión Logística: se emplea para estimar la probabilidad de que ocurra un evento binario, modelando el logaritmo de las odds de dicho evento en función de una o más variables independientes.

4. Validación del modelo: después de entrenar el modelo, se valida su rendimiento utilizando datos no etiquetados. Esto para que el modelo pueda diferenciar entre datos vistos y datos nuevos.
5. Predicción de sentimiento: una vez que el modelo está entrenado y validado, se utiliza para predecir los sentimientos de nuevos textos, analizando el texto de entrada y dándole una clasificación a cada oración.
6. Evaluación y elección del modelo: finalmente se evalúa el rendimiento del modelo utilizando métricas como precisión, matriz de confusión, entre otras.

La Figura 1a) ilustra la efectividad de un modelo clasificador binario basado en el Método de Bernoulli, interpretando cada celda de la siguiente forma:

- Verdaderos Negativos (*True Neg*): 39.64 % de las predicciones son correctamente identificadas como negativas.

- Falsos Positivos (*False Pos*): 10.35 % de las predicciones son incorrectamente identificadas como positivas cuando en realidad son negativas.
- Falsos Negativos (*False Neg*): 9.47 % de las predicciones son incorrectamente identificadas como negativas cuando en realidad son positivas.
- Verdaderos Positivos (*True Pos*): 40.55 % de las predicciones son correctamente identificadas como positivas.

El modelo tiene una precisión balanceada entre las predicciones de las clases positivas y negativas. La tasa de falsos positivos y falsos negativos sugiere que el modelo puede mejorarse, posiblemente ajustando el umbral de decisión o utilizando técnicas de balanceo de clases cuando el conjunto de datos está desequilibrado como en este caso.

La matriz de confusión de la Figura 1b con el modelo lineal SVC muestra:

- Verdaderos Negativos (*True Neg*): 40.47 % de todas las observaciones fueron correctamente clasificadas como clase negativa.
- Falsos Positivos (*False Pos*): 9.52 % de las observaciones fueron erróneamente clasificadas como clase positiva cuando en realidad son de la clase negativa.
- Falsos Negativos (*False Neg*): 8.64 % de las observaciones fueron erróneamente clasificadas como clase negativa cuando en realidad son de la clase positiva.
- Verdaderos Positivos (*True Pos*): 41.37 % de todas las observaciones fueron correctamente clasificadas como clase positiva.

La distribución de las predicciones sugiere que el modelo SVC tiene un rendimiento relativamente equilibrado en cuanto a la clasificación de ambas clases. La suma de los porcentajes de los verdaderos positivos y los verdaderos negativos da una medida general de la precisión del modelo. Los falsos positivos y negativos representan los errores del modelo y son comparativamente bajos, lo cual es positivo. Aunque este modelo dio resultados certeramente positivos, siempre hay espacio para optimizar el modelo, posiblemente ajustando parámetros del SVC.

El modelo de regresión logística de la Figura 1c muestra un rendimiento equilibrado en la identificación de las clases, con una ligera ventaja en la detección de verdaderos positivos. El porcentaje de errores de tipo I (falsos positivos) y tipo II (falsos negativos) es menor al 10 %, lo que sugiere una buena capacidad discriminativa del modelo arrojando los siguientes datos:

- Verdaderos Negativos (*True Neg*): 40.47 % de los casos fueron correctamente predichos como negativos por el modelo.
- Falsos Positivos (*False Pos*): 9.52 % de los casos fueron incorrectamente predichos como positivos.
- Falsos Negativos (*False Neg*): 8.64 % de los casos fueron incorrectamente predichos como negativos.
- Verdaderos Positivos (*True Pos*): 41.37 % de los casos fueron correctamente predichos como positivos.

Figura 1. a) Matriz de confusión del Modelo Bernoulli, b) Matriz de confusión del Modelo SVC y c) Matriz de confusión del Modelo de Regresión Logística



(a)



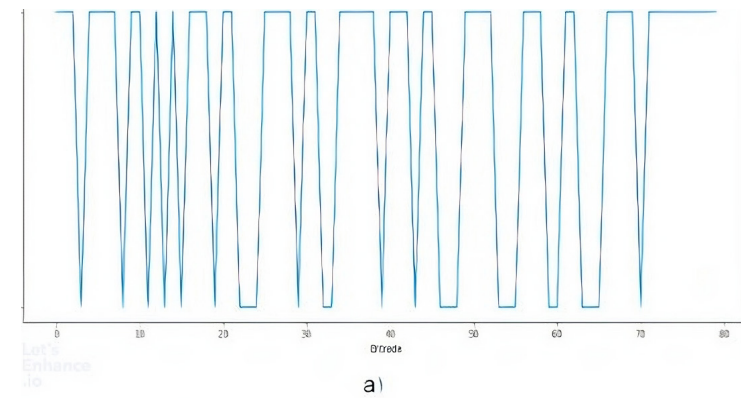
(b)



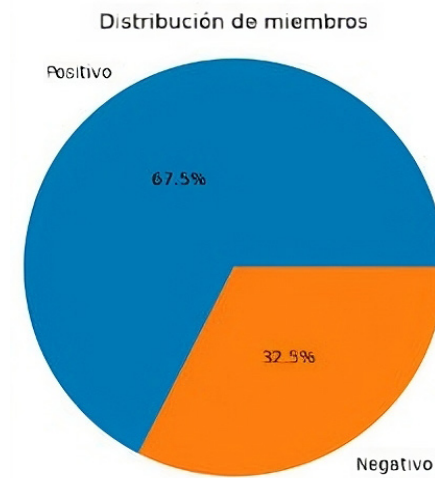
(c)

Una vez localizado el modelo más preciso el cual fue el Modelo de Regresión Logística, se analiza cada oración junto con su clasificación mostrando sus resultados, esto puede verse en la Figura 2a y Figura 2b.

Figura 2. a) Análisis de cada oración de predicción del modelo
b) Gráfico de pastel de sentimientos



a) Análisis de cada oración de predicción del modelo



b) Gráfico de pastel de sentimientos

La Figura 2a representa el análisis de cada verso de la canción junto con su clasificación. La Figura 2b muestra el porcentaje de cada sentimiento 67.5 % positivo, 32.5 % negativo o 0 % neutral.

ALGORITMOS DE CLASIFICACIÓN. DETECCIÓN DE FRAUDES EN TARJETAS DE CRÉDITO

Los algoritmos de clasificación se encargan de asignar un objeto a una entre varias categorías o clases previamente definidas, estas categorías pueden ser binarias o multiclase, y se determinan a partir de las categorías definidas en el conjunto de datos que se utilizará para el diseño y entrenamiento del modelo. De esta manera el modelo tendrá la capacidad de clasificar o etiquetar diferentes objetos de manera óptima.

Se desarrolló un script para aplicación de un modelo predictivo de fraudes en tarjetas de crédito, de igual manera el conjunto de datos para entrenar los diferentes clasificadores que se muestran a continuación se tomó del repositorio de GitHub proporcionado en el libro de Laura y Santi, el cual contiene registros de diferentes transacciones entre las cuales se describen las que se clasifican como fraude. Una vez entrenados los modelos se les evalúa con otro conjunto de datos que no se encuentran clasificados y así evaluar la precisión de la clasificación del modelo.

La estructura de este algoritmo se puede explicar en los siguientes pasos:

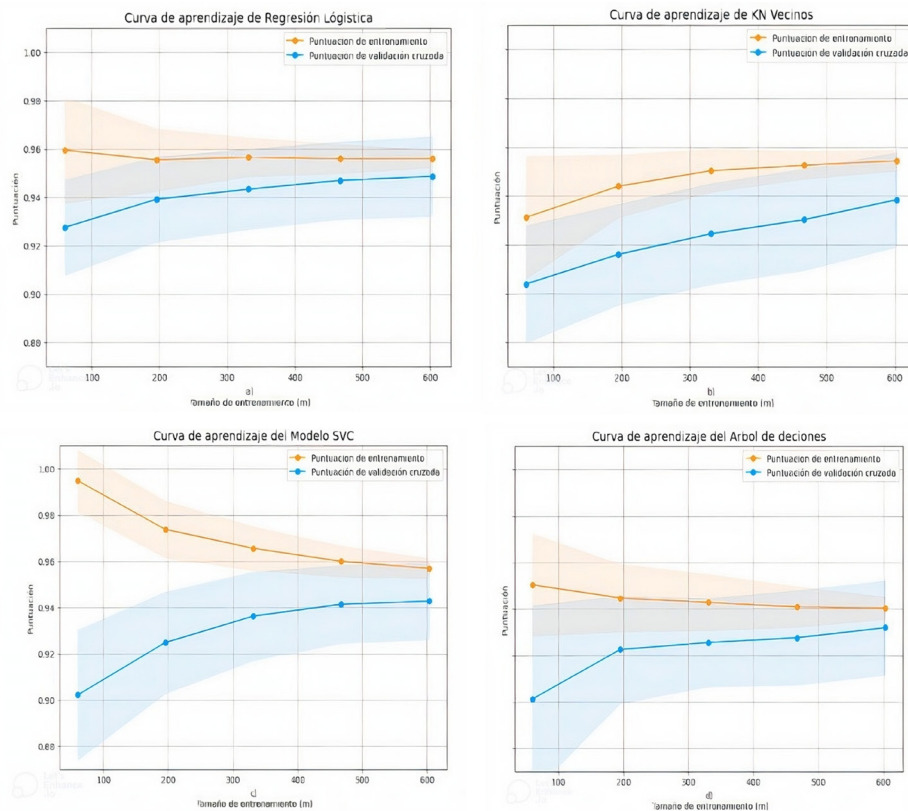
1. Recopilación de datos: el primer paso es recopilar datos históricos de transacciones de tarjetas de crédito. Estos datos incluyen información como la cantidad de la transacción, la ubicación, la hora del día, el tipo de transacción (en línea, en persona, etc.), entre otros detalles relevantes.
2. Preprocesamiento de datos: una vez que se tienen los datos, se realiza un proceso de preprocesamiento para limpiar y preparar los datos para el análisis. Esto puede incluir la eliminación de transacciones duplicadas, la normalización de valores numéricos y la codificación de variables categóricas.
3. División de datos: los datos se dividen en dos conjuntos: uno para entrenar el modelo y otro para probar su rendimiento. Es importante mantener estos conjuntos de datos separados para evaluar correctamente el rendimiento del modelo en datos que no ha visto durante el entrenamiento.

4. Selección y entrenamiento del modelo: se selecciona un algoritmo de aprendizaje automático adecuado para el problema de detección de fraudes, como árboles de decisión, bosques aleatorios, máquinas de vectores de soporte (SVM) o incluso enfoques más avanzados como redes neuronales. Los modelos utilizados en el script son:

- Regresión Logística: se utiliza para predecir la probabilidad de que una muestra pertenezca a una clase particular.
- KN-vecinos: clasifica una muestra basándose en las clases de las muestras vecinas más cercanas en el espacio de características.
- SVC: se utiliza para encontrar el resultado óptimo que separa diferentes clases en un espacio de características, maximizando el margen de relación entre ellas.
- Árbol de decisiones: son algoritmos de clasificación que dividen el espacio de características en regiones más pequeñas y más simples mediante la formulación de preguntas sobre las características en cada nodo del árbol.

5. Validación del modelo: después de entrenar el modelo, se evalúa su rendimiento utilizando el conjunto de datos de prueba. Se utilizan métricas como precisión, recall, F1-score y curvas ROC (Receiver Operating Characteristic) para evaluar qué tan bien el modelo está identificando transacciones fraudulentas sin generar demasiados falsos positivos (transacciones legítimas identificadas como fraudulentas).

Figura 3. Curva de aprendizaje de los diferentes modelos.



La curva de aprendizaje en el modelo de regresión logística de la Figura 3a representa como el rendimiento del modelo cambia a medida que aumenta el tamaño del conjunto de datos de entrenamiento, esto con la finalidad de que el modelo se ajuste mejor a los datos y mejorar la precisión con la que clasifica. La curva proporciona muestra dos métricas: el puntaje de entrenamiento, puntaje de entrenamiento y el puntaje de puntuación de validación cruzada, en función del tamaño de entrenamiento (n).

Para el puntaje de entrenamiento, comienza alto, lo que indica que el modelo se ajusta bien a un conjunto de datos pequeño. A medida que aumenta el tamaño del conjunto de datos, el puntaje de entrenamiento disminuye ligeramente, lo que es normal porque los modelos tienden a

ajustarse menos a medida que el tamaño del conjunto de datos aumenta y se vuelve más generalista.

Puntaje de validación cruzada, comienza más bajo que el puntaje de entrenamiento, sugiriendo que el modelo no generaliza tan bien al principio con datos no vistos. A medida que aumenta el tamaño del conjunto de datos, el puntaje de validación cruzada aumenta, lo que indica que el modelo está generalizando mejor con más datos. La tendencia ascendente se estabiliza alrededor de los 400 datos de entrenamiento, lo que sugiere que agregar más datos más allá de ese punto no mejora significativamente la capacidad del modelo para generalizar a nuevos datos.

El modelo se beneficia de más datos hasta cierto punto, después del cual el rendimiento en datos no vistos no mejora significativamente. La diferencia entre las curvas de entrenamiento y validación indica que hay una diferencia moderada entre el rendimiento del modelo en los datos de entrenamiento y su capacidad de generalización, lo cual es un signo de un ajuste adecuado, pero con espacio para mejorar, posiblemente a través de la regularización o la afinación de hiper parámetros. La sombra alrededor de las líneas indica la varianza del puntaje con diferentes divisiones de los datos; mientras más estrecha sea la sombra, más consistente es el modelo ante diferentes conjuntos de entrenamiento y validación.

La curva de aprendizaje del Modelo K-Nearest Neighbors (KNN,) de la Figura 3b representa cómo cambia el rendimiento del modelo a medida que se ajusta el número de vecinos más cercanos considerados en la clasificación, este valor es representado por la variable K en este caso se le asignó el valor de 5 vecinos. Se evalúan las dos métricas principales: el puntaje de entrenamiento y el puntaje de validación cruzada en relación con el tamaño del conjunto de entrenamiento. El puntaje de entrenamiento es alto en conjuntos de entrenamiento pequeños, indicando un buen ajuste a pocos datos. A medida que aumenta el tamaño de entrenamiento, el puntaje disminuye levemente, posiblemente debido a la menor influencia de los vecinos más cercanos en un espacio más grande. Para el puntaje de validación cruzada, comienza más bajo, lo que podría indicar un ajuste inicial pobre a datos no vistos. El modelo mejora con más datos de entrenamiento, lo cual es indicativo de una mejor generalización del modelo, aunque la mejora es positiva, la pendiente es suave, sugiriendo beneficios decrecientes con el aumento de datos.

La distancia entre las curvas representa la diferencia entre el rendimiento en los datos de entrenamiento y los datos de validación. La convergencia de las curvas a medida que se incrementa el tamaño de entrenamiento sugiere que el sobreajuste se reduce.

El modelo de KNN muestra una buena capacidad de generalización con un conjunto de entrenamiento más grande. Podría haber un punto de saturación donde añadir más datos no mejora significativamente la validación cruzada. La selección del número de vecinos y la métrica de distancia son parámetros críticos que deben ajustarse para optimizar el rendimiento de KNN.

La curva de aprendizaje del modelo SVC Figura 3c muestra cómo cambia el rendimiento del modelo a medida que se ajusta el parámetro de regularización (C), un C más alto permite que el modelo se ajuste más a los datos de entrenamiento. El gráfico muestra la curva de aprendizaje para un modelo de clasificación. Para el puntaje de entrenamiento, comienza con alta puntuación inicial que disminuye ligeramente a medida que el tamaño del conjunto de entrenamiento aumenta, lo cual es típico al agregar más datos que introducen variabilidad. La disminución en el puntaje de entrenamiento sugiere que el modelo se ajusta menos a los datos a medida que estos se incrementan, reduciendo el sobreajuste. Mientras que, para el puntaje de validación Cruzada, el puntaje es bajo con pocos datos, pero aumenta a medida que se añaden más datos, indicando una mejora en la generalización del modelo. Aunque el puntaje de validación sigue aumentando, la pendiente se suaviza, lo que podría sugerir un acercamiento al rendimiento máximo del modelo con los datos disponibles.

La diferencia entre el puntaje de entrenamiento y el de validación cruzada es notablemente pequeña, incluso con conjuntos de entrenamiento reducidos, y se mantiene constante. Esto implica que el SVC generaliza bien incluso con menos datos y no muestra un sobreajuste significativo. El modelo SVC muestra buena capacidad de generalización en el rango de datos observados. El modelo podría no requerir muchos más datos para lograr mejoras sustanciales en la validación cruzada, lo cual es beneficioso en situaciones donde la recopilación de datos es costosa o limitada.

La curva de aprendizaje del el Modelo a Árbol de decisión de la Figura 3d muestra cómo cambia el rendimiento del modelo a medida

que se ajusta la profundidad del árbol u otros parámetros relacionados con la complejidad del modelo. En la figura se puede observar que la curva de aprendizaje se vuelve muy precisa conforme se le inyecta una mayor cantidad de datos. En el puntaje de entrenamiento, empieza siendo alto, lo cual es característico de los árboles de decisión, ya que estos pueden capturar complejidades de un conjunto de entrenamiento reducido, resultando en un sobreajuste inicial, a medida que el conjunto de entrenamiento se agranda, el puntaje de entrenamiento disminuye, indicando que el modelo no se ajusta tan perfectamente a los datos, lo cual es una señal de que el sobreajuste está siendo mitigado. Para el puntaje de validación cruzada, inicia a un nivel bajo, lo que sugiere que el modelo no generaliza bien con un conjunto de datos pequeño. Conforme se agregan más datos, el puntaje de validación cruzada aumenta, lo que indica una mejor generalización. La convergencia de ambas curvas es menos pronunciada en comparación con otros modelos, lo que puede indicar que la capacidad del árbol de decisión para generalizar no mejora tan significativamente con más datos.

Su diferencia se reduce a medida que aumenta el tamaño del conjunto de entrenamiento, pero no se cierra tanto como podría esperarse. Esto puede deberse a que los árboles de decisión son propensos al sobreajuste, y sin la poda adecuada o técnicas como ensemble learning, pueden no generalizar bien. El modelo muestra una tendencia a sobre ajustarse, especialmente con conjuntos de datos más pequeños. La curva de aprendizaje sugiere que obtener más datos podría no resultar en mejoras sustanciales en la validación cruzada si no se ajustan adecuadamente los parámetros del modelo.

Al final el modelo con mayor precisión es el de Regresión logística, con una precisión del 97.41 % en sus predicciones.

BANCOS DE PREGUNTAS REFLEXIVAS SOBRE CIENCIA DE DATOS

El preguntario LANCOSPRU es un método sistemático para generar y aplicar preguntas. Su acrónimo significa Listado (creación libre de preguntas respecto al tema), Agrupación (de preguntas por similitud propósito), Nombramiento (o etiquetación de cada uno de los grupos), Completación (creación de preguntas a partir de la perspectiva del nombre, en cada grupo), Ordenamiento (de preguntas dentro y fuera de los grupos),

Selección (de preguntas “interesantes” de cada grupo), Progenie (creación de nuevas preguntas a partir de otras), Resolución (encontrar las respuestas a las preguntas) y Uso (usar las respuestas de las preguntas) (González Silva R. A. y Ablica Jacinto N.L., 2023).

Con la aplicación de esta metodología damos pauta a una reflexión filosófica de la Ciencia de Datos, para su aplicación sistemática y profunda.

PREGUNTARIO LANCONSPRU SOBRE CIENCIA DE DATOS

Aplicando la técnica de preguntario LANCONSPRU de manera colectiva, se desarrolló un banco de preguntas de más de 150 en total. Después se agrupan o clasifican en 18 grupos y cada uno consta de más de 15 preguntas.

La creación de estos grupos se fue generando en base a la similitud de las preguntas, la cual está determinada por algunos de sus conceptos clave, propósito, conexión o complementación integral.

Aunque se podrían presentar de manera exhaustiva todas las preguntas, a continuación, mostramos algunas de las preguntas fundamentales o más valiosas en cada una de las directrices, son:

1. Ciencia, teoría y filosofía de la Ciencia de Datos
 - a. ¿Qué relaciones, proposiciones, teoremas son de la Ciencia de Datos?
 - b. ¿Cuál es la ciencia en la Ciencia de Datos?
 - c. ¿Cuál es el objeto de estudio de la Ciencia de Datos?
 - d. ¿Cuáles son los principios fundamentales de la Ciencia de Datos?
2. Introducción y conceptos básicos
 - a. ¿Qué hace la Ciencia de Datos?
 - b. ¿Cuál es la diferencia entre Ciencia de Datos y análisis de datos?
 - c. ¿Cuáles son los conceptos y términos de la Ciencia de Datos?
3. Proceso y metodología
 - a. ¿Qué o cuáles son los tipos de procesos o métodos que tiene la Ciencia de Datos?

- b. ¿Cómo saber qué algoritmo utilizar según los datos?
 - c. ¿Cómo y cuándo se aplica cada uno de los métodos de la Ciencia de Datos?
4. Aplicaciones y utilidades
 - a. ¿Cómo articular entre el problema o fenómeno de estudio y sus datos, su análisis o su modelo; de la manera más visual posible?
 - b. ¿Cuántos datos hay que tomar para hacer un análisis de datos para hacer Ciencia de datos de algún objeto o problema de investigación?
 - c. ¿Dónde, cuándo y cómo se aplica la Ciencia de Datos?
5. Herramientas y tecnologías
 - a. ¿Qué software se utiliza en Ciencia de Datos?
 - b. ¿Cuál es la mejor manera de almacenar datos?
 - c. ¿Cuáles son las herramientas de visualización de datos más populares?
6. Formación y carrera profesional
 - a. ¿Cómo iniciar en el mundo de la Ciencia de Datos?
 - b. ¿Qué conocimientos previos se necesitan para el análisis de datos?
 - c. ¿Qué se necesita para ser un profesional en la Ciencia de Datos?
 - d. ¿Cuál es la demanda laboral actual de los científicos de datos?
7. Ética y responsabilidad
 - a. ¿Qué aspectos éticos se deben considerar en la Ciencia de Datos?
 - b. ¿Quién es responsable de la gobernanza de datos en la Ciencia de Datos?
 - c. ¿Cómo se aborda el sesgo y la discriminación en el análisis de datos?

8. Análisis de datos y modelos

- a. ¿Cómo encontrar patrones de datos?
- b. ¿Cómo son los modelos de Ciencia de Datos y cómo hacerlos?
- c. ¿La ciencia de datos vs investigación cualitativa, que tanto se complementan?

9. Recopilación y tratamiento de datos

- a. ¿Qué formas de recopilar datos existen para generar bases de datos?
- b. ¿Cómo obtener bases de datos confiables?
- c. ¿Cuáles son las técnicas de muestreo utilizadas en la recopilación de datos?
- d. ¿Cómo se realiza el etiquetado y anotación de datos en ciencia de datos?
- e. ¿Cuál es el papel de la limpieza y preprocesamiento de datos en el análisis?

10. Visión y misión de la Ciencia de Datos

- a. ¿Cuál es la visión de la Ciencia de Datos?
- b. ¿Cuál es la misión de la Ciencia de Datos?
- c. ¿Cuál es el impacto social de la Ciencia de Datos?
- d. ¿Cómo contribuye la ciencia de datos al avance científico y tecnológico?

11. Reflexiones y opiniones

- a. ¿Qué piensa un científico de datos sobre su trabajo?
- b. ¿Por qué es bueno utilizar la Ciencia de Datos?
- c. ¿Por qué quieres saber información de los datos?

12. Aspectos monetarios y empresariales

- a. ¿Cuánto gana un científico de datos?
- b. ¿Cuántos científicos de datos se necesitan en el mundo?
- c. ¿Cuánto cobrar por un proyecto en Ciencia de Datos?

13. Aprendizaje automático y redes neuronales

- a. ¿Cómo funcionan las redes neuronales en la Ciencia de Datos?
- b. ¿Qué es el aprendizaje profundo (Deep Learning)?
- c. ¿Cuáles son los principales tipos de algoritmos de aprendizaje automático?
- d. ¿Cuál es la diferencia entre aprendizaje supervisado y no supervisado?

14. Investigación en Ciencia de Datos

- a. ¿Cuáles son los problemas de investigación de la Ciencia de Datos?
- b. ¿Cuáles son las preguntas de investigación de la Ciencia de Datos?
- c. ¿Cómo son los modelos de Ciencia de Datos y cómo hacerlos?
- d. ¿Interpretación de los análisis de los datos?

15. Grupo: Big Data

- a. ¿Qué es Big Data y cómo se relaciona con la Ciencia de Datos?
- b. ¿Cuáles son las características y ventajas del análisis de Big Data?
- c. ¿Cómo se maneja el almacenamiento y procesamiento de Big Data?
- d. ¿Cuáles son las tecnologías utilizadas en el análisis de Big Data?

16. Visualización de datos

- a. ¿Por qué es importante la visualización de datos en la Ciencia de Datos?
- b. ¿Cuáles son las mejores prácticas para la visualización de datos?
- c. ¿Qué tipos de gráficos y diagramas se utilizan en la visualización de datos?

17. Privacidad y seguridad de datos

- a. ¿Cómo se protege la privacidad de los datos en la Ciencia de Datos?
- b. ¿Qué técnicas se utilizan para el anonimato de datos en la Ciencia de Datos?
- c. ¿Cuáles son los desafíos de seguridad asociados con la Ciencia de Datos?
- d. ¿Cómo se abordan los riesgos de seguridad en el análisis de datos?

18. Futuro de la Ciencia de Datos

- a. ¿Cuáles son las tendencias actuales en la Ciencia de Datos?
- b. ¿Cuáles son las tecnologías emergentes en la Ciencia de Datos?
- c. ¿Cuáles son los retos y oportunidades futuras de la Ciencia de Datos?
- d. ¿Cómo se espera que evolucione la ciencia de datos en los próximos años?

Esta actividad de elaboración del preguntario, aunque solamente se desarrolló a nivel de dos fases (de un total de nueve). Tiene identificados los siguientes efectos o implicaciones en su realización:

- Fomento del Pensamiento Crítico y Creativo
- Desarrollo de Habilidades de Investigación.
- Generación de Nuevas Ideas de Investigación

- Focos de análisis o perspectivas de análisis e interpretación de gráficos o indicadores estadístico
- Ayuda a determinar la naturaleza, visión, misión, filosofía y evolución de la Ciencia de Datos
- Sirve para generar perspectivas de curiosidad, observación y estructuramiento de la Ciencia de Datos

PREGUNTARIO LANCONSPRU SOBRE ANÁLISIS DE DATOS

También se aplicó la metodología del preguntario LANCOSPRU al concepto “análisis de datos”. Éste se desarrolló de manera colaborativa, virtual y sincrónica en la plataforma de Google Docs, se desarrolló un banco de más de 150 preguntas donde se pretende mostrar todas las perspectivas que debe haber a la hora de trabajar con Análisis de Datos y bases de datos. Esto va desde la planeación de la obtención de la base de datos, el diseño de cómo obtener los datos, la realización de la base de datos, la captura y depuración de la base de datos, las preguntas de investigación, de análisis de los datos, la representación gráfica de los cálculos y la interpretación gráficas e indicadores.

En este caso la metodología del preguntario LANCOSPRU, solamente se llevó hasta la fase uno, es decir la creación del banco de datos de preguntas, En una futura investigación se podría desarrollar las futuras fases del preguntario LANCOSPRU al “análisis de datos”. Algunas preguntas de las que podremos resaltar como importantes, interesantes y generales, que podríamos calificar de preguntas inteligentes, son las siguientes

1. Qué
 - ¿Qué preguntas se hacen antes de analizar los datos?
 - ¿Qué tipos de indicadores son fundamentales en una base de datos?
 - ¿Qué hacer cuando faltan datos en la base de datos?
2. Dónde
 - ¿Dónde se guardan las bases de datos?
 - ¿Dónde reside la información crítica en una base de datos?
 - ¿Dónde deberíamos buscar información para una base de datos?

3. Quién
 - ¿Quién debe hacer el análisis de datos?
 - ¿Quién es el principal diseñador de la estructura de nuestra base de datos?
 - ¿Quién es el responsable de administrar y mantener la base de datos?
4. Cuándo
 - ¿Cuándo se hace un análisis de datos?
 - ¿Cuándo sí/no es correcto un análisis de datos?
 - ¿Cuánto se puede profundizar en un análisis de datos?
5. Cómo
 - ¿Cómo saber qué tipos de datos son importantes para el análisis de datos?
 - ¿Cómo determinar los patrones de los datos?
 - ¿Cómo se visualizan los datos?
6. Cuánto
 - ¿Cuántos tipos de datos puede tener una base de datos?
 - ¿Cuánto espacio ocupa y energía para almacenar los datos de una empresa?
 - ¿Cuánta información puede dar una base de datos?
 - ¿Cuánta información intrínseca tiene una base de datos?
7. Cuál
 - ¿Cuál es la empresa que más datos genera?
 - ¿Cuáles son los principales indicadores de una base de datos?
 - ¿Cuál es un Dashboard ideal para mostrar el análisis de datos?
 - ¿Cuáles son las principales técnicas para limpiar los datos?
8. Por qué
 - ¿Por qué es importante visualizar los datos?
 - ¿Por qué en los datos están o surgen interrelaciones entre ellos?
 - ¿Por qué es complicado obtener algunas bases de datos?
9. Para qué
 - ¿Para qué son las bases de datos?
 - ¿Para qué hacer la limpieza de las bases de datos?
 - ¿Para qué NO sirven las bases de datos?

Cabe mencionar que las preguntas fueron agrupadas básicamente desde la palabra interrogativa, aunque, no por esto quiere decir que es el grupo en que corresponde para su utilidad, aplicación o uso. Otra de las implicaciones que podríamos decir a la hora de generar o aplicar el preguntario LANCOSPRU es que con esto se pueden generar preguntas inteligentes. Éstas son un tipo de preguntas que tiene un cierto valor de interés, que tienen efectos impactos, es decir, no son simples; por eso para darles respuesta casi siempre se requiere de una estrategia.

CONCLUSIONES

De manera general, podemos decir que este proyecto generó resultados de formación académica, conocimientos en métodos de investigación, investigación colaborativa, generalizaciones de algoritmos de Análisis de Datos, una buena comprensión de la Ciencia de Datos y una bibliografía selecta para su estudio.

La aplicación de las dos fases del preguntario LANCOSPRU, generó efectos diversos, desde la misma concepción del objeto de las preguntas, el desarrollo de reflexiones profundas sobre el concepto y la articulación entre las preguntas, habilidades blandas de inteligencia colectiva y el uso de software para manejar las preguntas de una manera más global. En este sentido, concluimos que otros usos para los preguntarios, pueden ser para generar: hipótesis, determinar focos de análisis de datos o información, determinar desarrollos o estrategias de acción, elaborar preguntas de investigación, generar teorías o metodologías.

Durante el verano también se realizaron las siguientes autocapacitaciones:

- Autocapacitación en Ciencia de Datos: se estudiaron dos libros de Ciencia de datos además de diversas páginas web, en las que además de contener información técnica, tenían bases de datos y ejercicios para practicar.
- Autocapacitación en Análisis de datos: se tomaron por parte de Coursera un curso de Análisis de Datos de la empresa Google, el cual comprendía ocho niveles, y se lograron tres certificaciones (niveles).
- Autocapacitación en Python: la información necesaria para comprender y usar el lenguaje de Python se toma de diversos libros y videos de YouTube.

- Autocapacitación en Tableau: se tuvo una capacitación en el software Tableau, con esto se entendió como manejar de manera visionaria los Dashboards de un análisis de datos (Pat Hanrahan, 2003).

Para terminar, podemos decir que se lograron muchos resultados, pero quedaron muchos más en puerta, para futuros trabajos, tales como el desarrollo de una sistematización de los procesos de análisis de datos, la mejora de algoritmos para su implementación práctica a casos de estudio y un portafolio de servicios de Ciencia de Datos.

REFERENCIAS

- Agarwal, R. y Dhar, V. (2014). Big Data, Data Science, and Analytics: The Opportunity and Challenge for IS Research. *Information Systems Research*, 25(3) 443–448. <https://doi.org/10.1287/isre.2014.0546>
- Cao, L. (2010). Domain-driven data mining: Challenges and prospects. *Knowledge and Data Engineering*, 22(6) 755–769 <https://doi.org/10.1109/TKDE.2010.32>
- Cao, L. (2019). Data Science: Profession and Education. *IEEE Intelligent Systems*, 34(5) 35–44 <https://doi.org/10.1109/MIS.2019.2936705>
- Cao, L. (2020). Data Science: A Comprehensive Overview. *ACM Computing Surveys*, 50(3). <https://doi.org/10.1145/3076253>
- Chen, H., Chiang, R. H. L. y Storey, V. C. (2012). Business intelligence and analytics: From big data to big impact. *MIS Quarterly: Management Information Systems*, 36(4) 1165–1188 <https://doi.org/10.2307/41703503>
- China Government. (5 de septiembre de 2015). *China Big Data*. <http://www.gov.cn/zhengce/content/2015-09/05/>
- Chris Yiu. (3 de julio de 2012). *The Big Data Opportunity: Making government faster, smarter and more personal*. Policy Exchange <https://policyexchange.org.uk/publication/the-big-data-opportunity>
- Donoho, D. (2017). 50 Years of Data Science. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 26(4) 745–766 <https://doi.org/10.1080/10618600.2017.1384734>
- Gil Press. (2013). *A Very Short History Of Data Science*. <https://www.forbes.com/sites/gilpress/2013/05/28/a-very-short-history-of-data-science/?sh=7b30bo6a55cf>
- GitHub.(2023).*Data-Science-Verano-2023-CULagos*. <https://github.com/SJLM25/Data-Science-Verano-2023-CULagos>
- González Silva R. A. y Abrica Jacinto N.L. (2023). Preguntario LANCOSPRU: una pedagogía activa para preguntas inteligentes. En Moreo, C.I, Pérez, R. y Inguanzo, B.L. (Coords) *Aprendizaje híbrido y pedagogías activas* (1 ed., Vol. 1, 100–116). Universidad de Guadalajara.
- Hey, T., Tansley, S., Tolle, K. y Gray, J. (2009). The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery en Hey, T., TanSley, S. y Tolle, K. (Eds) *The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery* (39–44).Microsoft Research <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/fourth-paradigm-data-intensive-scientific-discovery/>
- Hey, T. y Trefethen, A. (2003). The Data Deluge: An e-Science Perspective. Grid Computing en Berman, F., Fox, G. y Hey, T (Eds) *Grid Computing: Making the Global Infrastructure a Reality* (809–824) <https://doi.org/10.1002/0470867167.CH36>
- Horizon. (2014). *European Commission Horizon 2020 Big Data Private Public Partnership*. https://research-and-innovation.ec.europa.eu/funding/funding-opportunities/funding-programmes-and-open-calls/horizon-2020_en
- Igual, L. y Seguí, S. (2017). Introduction to data science: a Python approach to concepts, techniques and applications. Springer
- Jagadish, H. V., Gehrke, J., Labrinidis, A., Papakonstantinou, Y., Patel, J. M., Ramakrishnan, R. y Shahabi, C. (2014). Big data and its technical challenges. *Communications of the ACM*, 57(7), 86–94 <https://doi.org/10.1145/2611567>
- Jim Gray. (2007). eScience: a transformed scientific method. en Hey, T., TanSley, S. y Tolle, K. (Eds) *The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery* (17–31). Microsoft Research.
- Khan, N., Yaqoob, I., Hashem, I. A. T., Inayat, Z., Mahmoud Ali, W. K., Alam, M., Shiraz, M. y Gani, A. (2014). Big data: Survey, technologies, opportunities, and challenges. *Scientific World Journal*, <https://doi.org/10.1155/2014/712826>
- Labrinidis, A. y Jagadish, H. V. (2012). Challenges and opportunities with big data. *Proceedings of the VLDB Endowment*, 5(12), 2032–2033. <https://doi.org/10.14778/2367502.2367572>
- Loukides, M (2 de junio de 2010). *What is data science?* O'Reilly. <https://www.oreilly.com/radar/what-is-data-science/>
- Notion Labs Inc. (2016). *Notion*. www.notion.so
- O'Reilly. (2005). *What Is Web 2.0*. <https://www.oreilly.com/pub/a/web2/archive/what-is-web-20.html>
- Pat, C. S. (2003). *Tableau Software*. www.tableau.com
- Roy, T., Jerry, O. y Mike, M. (2020). Obsidian. <https://obsidian.md/>
- UN. (2010). *United Nation Global Pulse Projects*. <https://www.unglobalpulse.org/> XMind Ltd. (2007). XMind. <https://xmind.app/>

Puesta a punto de un sistema cartesiano para la fabricación de prototipos en circuitos impresos

LUIS GERMÁN PÉREZ HERNÁNDEZ
german.perez@alumnos.udg.mx

JESÚS RICARDO SEVILLA ESCOBOZA
jesus.sescoboza@academicos.udg.mx

RESUMEN

La puesta a punto de un sistema cartesiano para la fabricación de prototipos en circuitos impresos implica la preparación de materiales y software, diseño y generación de archivos G-code, configuración y calibración precisa de la máquina CNC, preparación adecuada del material de PCB, ejecución controlada del proceso, inspección de calidad y correcciones si es necesario. La documentación meticulosa de todo el proceso es fundamental para futuras referencias y mejoras. La atención a los detalles y las prácticas seguras son esenciales a lo largo de este proceso, que combina habilidades técnicas, conocimiento de diseño y manejo de maquinaria CNC. Al seguir estos pasos, los fabricantes de prototipos pueden lograr circuitos impresos de alta calidad, lo que es crítico en la industria de la electrónica y la innovación tecnológica.

PALABRAS CLAVE

PCB (Printed Circuit Board), Código G (G-code), CNC (Computer Numerical Control), Fresado (milling), Prototipos (prototypes).

INTRODUCCIÓN

La fabricación de PCBs es fundamental para la electrónica moderna, permitiendo la interconexión eficiente de componentes electrónicos en una placa física. Estas proporcionan conexiones eléctricas de manera compacta y organizada, siendo esenciales para el funcionamiento de los dispositivos.

Los primeros principios de circuito se basaban en métodos aditivos o de acumulación donde los conductores se depositaban sobre el dieléctrico siendo este el método más sencillo y el proceso más obvio. El grabado con ácido se conoce desde hace siglos, ya que el ácido se produce fácilmente mediante procesos naturales, tales como la fermentación.

Las tecnologías convencionales de fabricación y montaje de placas de circuito impreso implican el uso de:

- Tecnologías de litografía y grabado húmedo para la creación de patrones de conducción de cobre
- Material conductor de cobre estándar como interconexiones
- Tecnología estándar de ensamblaje para soldaduras para el montaje de componentes en las pistas de cobre de la placa del circuito impreso.
- Componentes eléctricos y sensores disponibles en el mercado que permiten realizar circuitos de alta complejidad y funcionalidad.

Existen varias técnicas de fabricación de prototipos de PCBs , cada una con sus propias ventajas y desafíos. Algunas de las técnicas más comunes son:

1. PCB perforada o placa experimental: Utiliza placas de papel duro o resina epoxi con agujeros perforados de 2.54 mm. Es adecuada para prototipos rápidos, pero no es duradera a largo plazo.
2. Fresado CNC: Esta técnica utiliza una máquina CNC para eliminar el cobre de una placa de sustrato, creando pistas conductoras y áreas aisladas. Es adecuada para prototipos pequeños y ofrece alta precisión, pero puede ser lenta para diseños complejos.
3. Grabado de PCB: Elimina el cobre selectivamente usando tinta resistente al agua y una solución grabadora. Es apto para prototipos caseros, pero tiene limitaciones en el ancho de las pistas y la producción en masa.

Métodos de transferencia de tóner: Involucran la impresión de un diseño en papel de transferencia de tóner y su transferencia al sustrato de cobre. Luego se utiliza un ácido para grabar las pistas. Esta técnica es accesible y adecuada para prototipos simples.

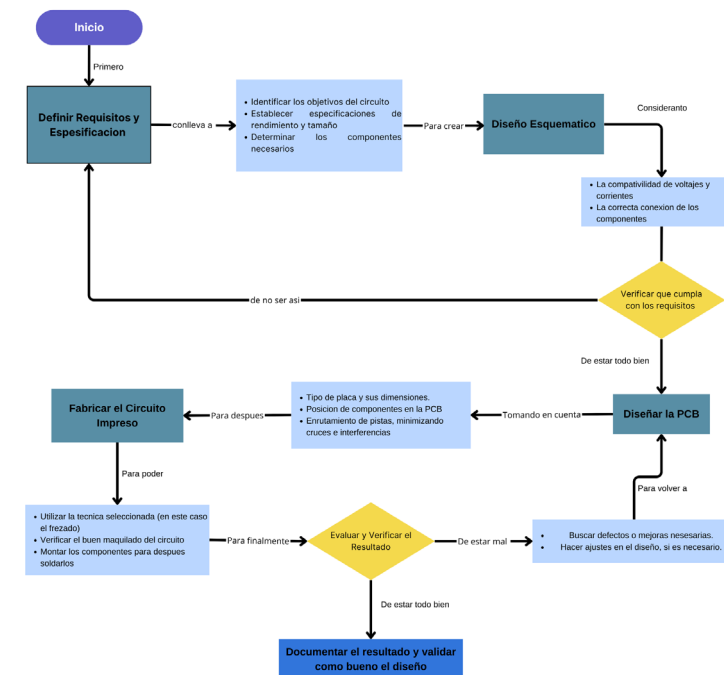
En cuanto a software, hay varias opciones populares para el diseño de PCBs, incluyendo *Altium Designer*, *KiCad*, *Eagle*, *OrCAD*, y *PROTEUS*. Estos programas permiten a los diseñadores crear esquemáticos, diseñar pistas, y generar archivos *Gerber*, que son esenciales para la fabricación de PCBs. La elección del software depende de las necesidades del proyecto y las preferencias del diseñador.

MATERIALES Y MÉTODOS

Se utilizaron softwares para el diseño y control de las herramientas, incluyendo la comunicación con las herramientas de diseño de PCBs como instrumentos de investigación.

Se recolectaron y analizaron los datos a través de la observación mediante prueba y error para verificar cuáles serían los mejores parámetros para el ajuste y la calibración de la máquina para la fabricación de prototipos PCB.

Figura 1. Diagrama sobre el diseño de una PCB



Como primer paso para diseñar una PCB se obtiene el circuito, este es vital importancia ya que es la información más útil que recibirá el diseñador. Por lo tanto, es fundamental disponer de un circuito claro, legible y totalmente codificado. Es importante reconocer los diferentes símbolos a utilizar.

Figura 2. Recopilación de los circuitos a imprimir

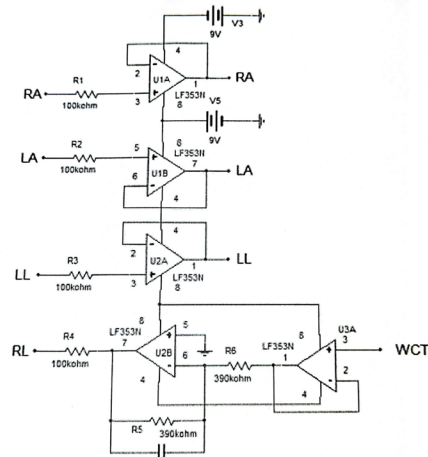


Figura 18 Circuito de protección y acople de impedancia

(a)

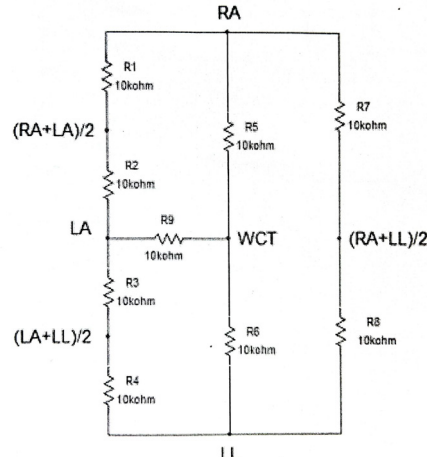


Figura 21 Circuito Terminal Central de Wilson

(b)

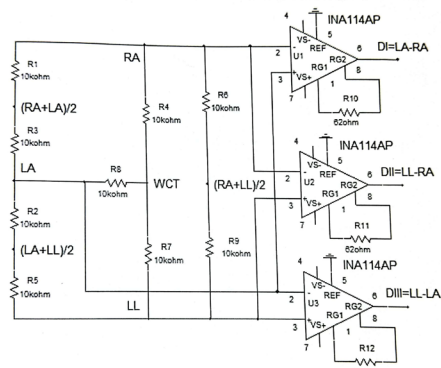


Figura 23 Circuito Derivaciones Bipolares

(c)

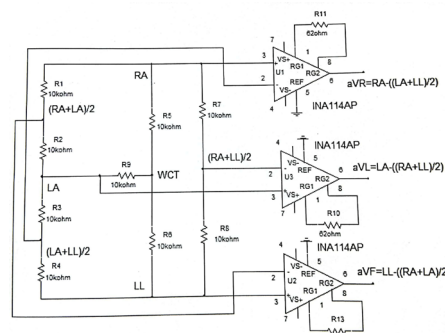


Figura 24 Circuito Derivaciones Aumentadas

(d)

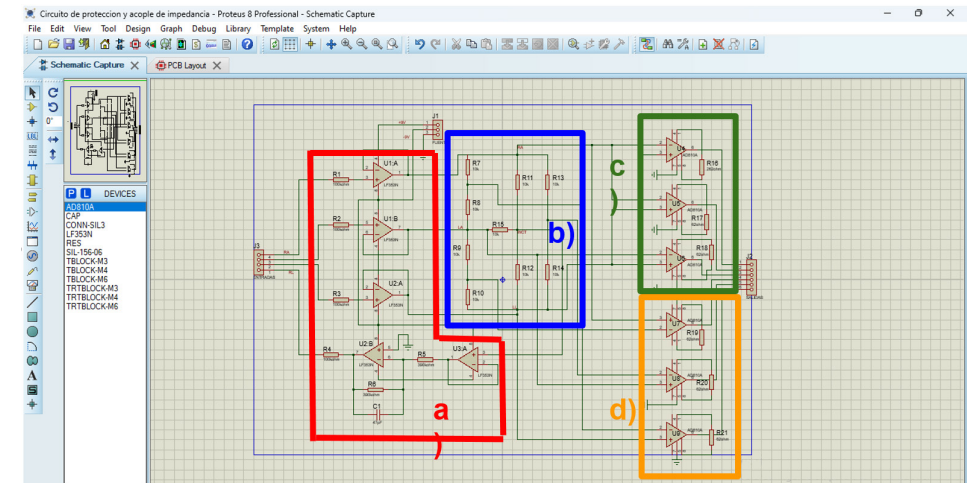
Se debe tener en cuenta que el diagrama del circuito es un dibujo esquemático por lo que el esquema no debe tomarse al pie de la letra. La posición física de los componentes en una PCB rara vez, por no decir nunca, se ajustarán a las posiciones indicadas en el diagrama.

Antes de comenzar con el diseño del trazado de la PCB, hay que considerar que el material seleccionado debe:

- Ser lo suficientemente resistente para soportar choques mecánicos.
- Ser resistente al calor para los distintos procesos de fabricación.
- Tener propiedades eléctricas adecuadas para los circuitos eléctricos.
- Ser resistente a los riesgos medioambientales.
- Está disponible en grandes planchas que puedan cortar y taladrar fácilmente.
- Tener propiedades ignífugas.
- Tener un precio razonable.

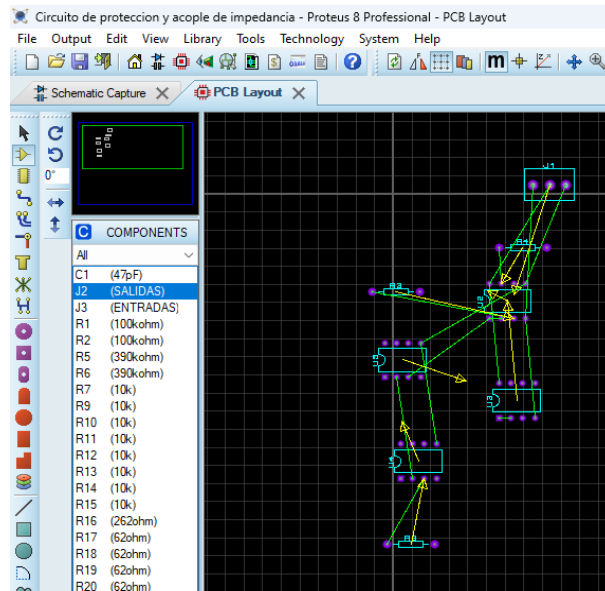
Para eso, como anteriormente hemos dicho, se utilizará el software se *Proteus* tanto para el diseño esquemático como para el trazado de líneas.

Figura 3. Diseño del dibujo esquemático en Proteus



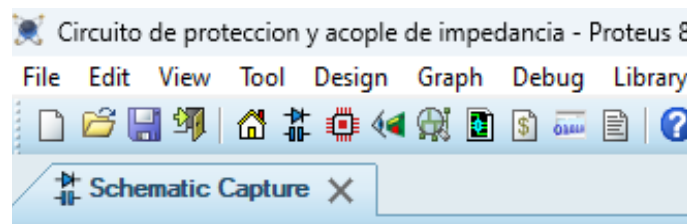
Una vez hecho el dibujo esquemático procedemos a buscar el icono de PCB Layout el cual se señala en la figura 4 que se encuentra debajo de Design.

Figura 5 Muestra del espacio de trabajo en Proteus



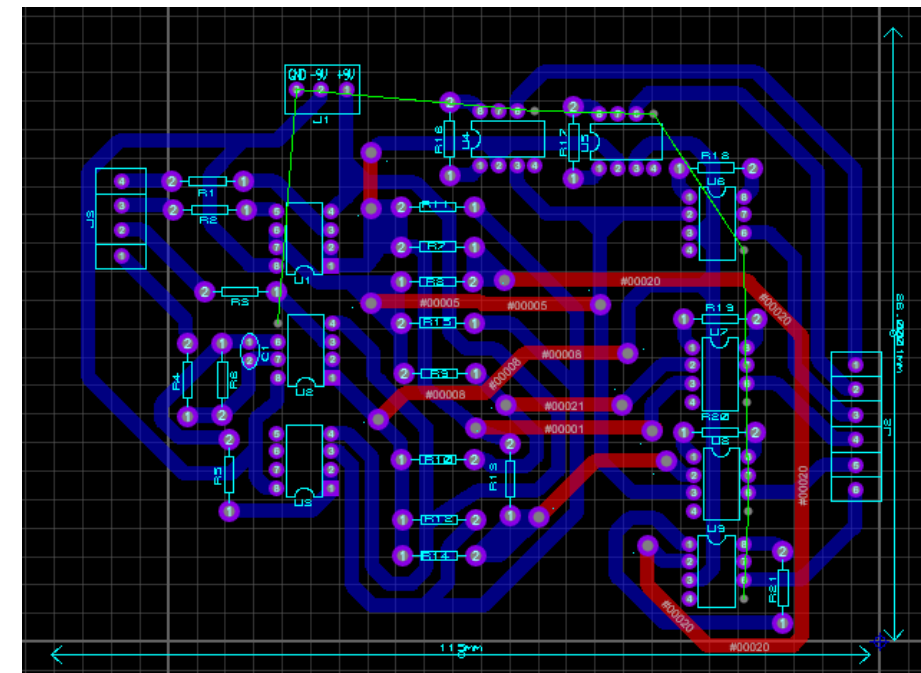
Al tener abierta la página aparecerá nuestro espacio de trabajo, en el cual rellenamos con los componentes que se encuentran al lado izquierdo de nuestra pantalla en la sección COMPONENTS. Una vez hecho esto arrastraremos cada uno de los componentes de nuestro circuito a nuestra zona de trabajo.

Figura 4. Iconos en Proteus



Con la ayuda de diversa herramienta que tiene PROTEUS cada uno de los componentes está conectado mediante una línea verde que nos dice dónde va conectada cada terminal y una flecha amarilla que nos da guía de hacia dónde podemos mover nuestros componentes, todo esto con el fin de guiarnos para después hacer nuestras conexiones. Las recomendaciones para el tamaño de las pistas de conexión deben encontrarse en el rango T_{30} hasta T_{100} . En cuanto a los orificios, PROTEUS los proporciona automáticamente en cada una de los componentes.

Figura 6. Circuito Trazado en Porteus



A medida que se desarrolla el diseño se deducirá (como en este caso) si la placa será de una o dos caras. Si el circuito es sencillo y directo, debe procurarse que el material quede de una sola cara, incluso si se debe usar cables de conexión. El diseñador debe hacer lo posible para ahorrar costes de producción. Es difícil ponerle una regla, pero para placas de menos de 50 componentes todo lo que supere los 4 o 5 eslabones debería ser

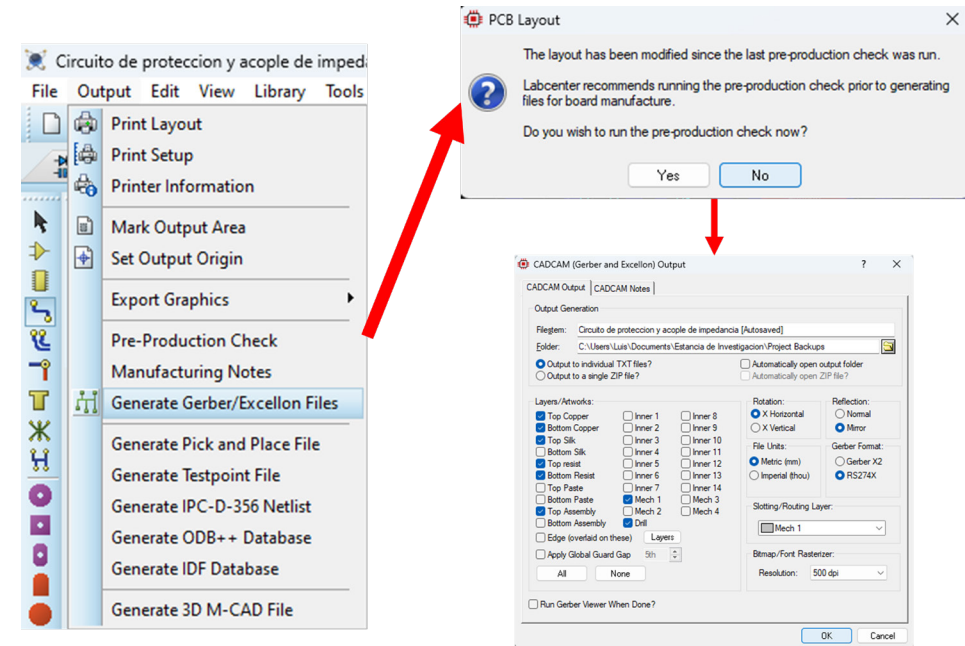
de doble cara. Cuando se utilicen cables de enlace o puentes, es mejor colocarlos desde el lado del componente con un paso de montaje común, para facilitar los métodos de montaje en producción.

Algunas consideraciones extras a la hora del diseño de la PCB son:

- Tipo de placa y sus dimensiones, para entender cuánto espacio contamos para el acomodo de componentes.
- Posición de los componentes PCB, esto para un mejor acomodo a la hora de soldar los componentes además del mejor acomodo de componentes variables como potenciómetros o circuitos de alta impedancia.
- Enrutamiento de pistas, con la finalidad de minimizar las interferencias y evitar lo más que se puedan las cruces o las uniones de 90°.
- Condiciones térmicas, si es el caso de llegar a utilizar componentes sensibles.

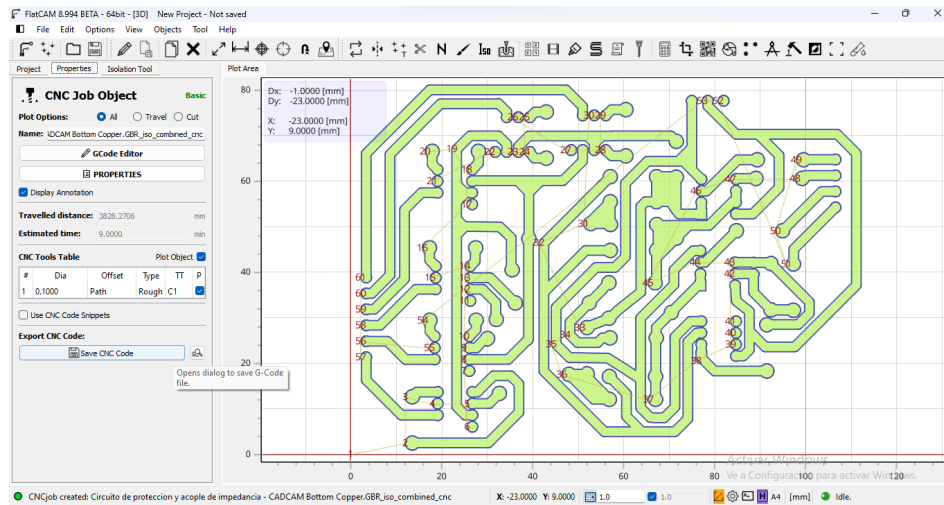
Al finalizar el diseño con la opción de *PROTEUS* nos iremos a Output en donde seleccionaremos la opción *Generate Gerber/Excellon Files*, luego de presionar en NO nos aparecerá un pestaña en la cual, después de verificar donde pondremos los archivos y cuáles capas vamos a imprimir (principalmente la *Bottom Copper*), seleccionaremos *Mirror* en la sección *Reflection*, para que se imprima en forma de espejo y *RS274X* en la sección *Gerber Format* para trabajar en FlatCAM, y crear nuestro código G.

Figura 7. Exportación de Proteus a FlatCAM



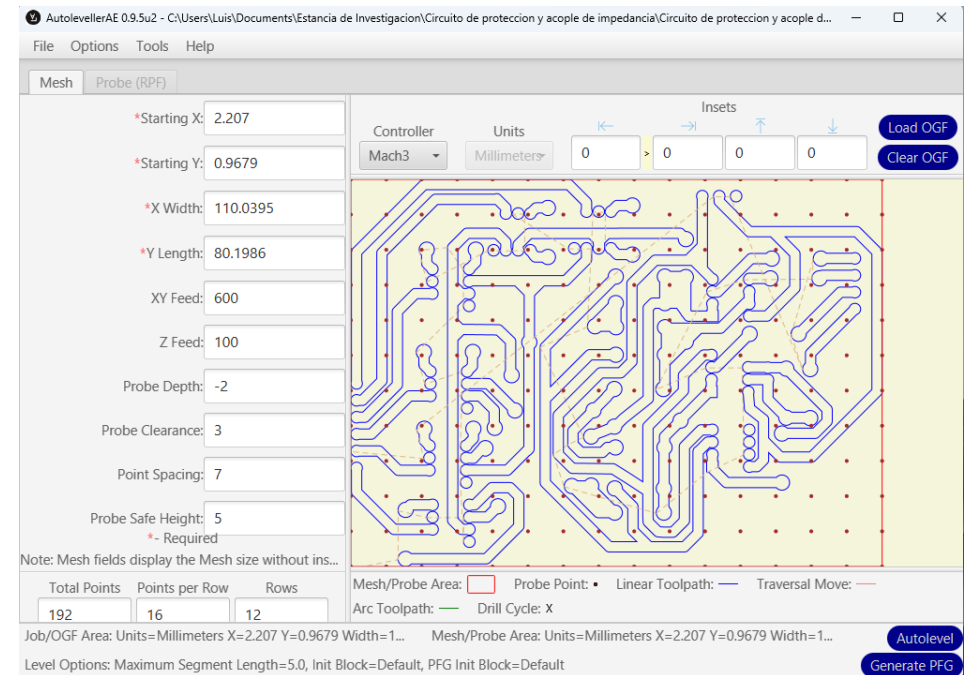
FlatCAM es un software que facilita el proceso de fabricación de circuitos impresos al convertir archivos de diseño de PCB en instrucciones de código G para máquinas CNC. Este software nos permite manipular algunas condiciones para el fresado de la PCB, tales como la profundidad de corte, la velocidad del corte, las pasadas que se les darán a cada pista entre otras cosas.

Figura 8. Visualización de FlatCAM



Después de terminar el código en FlatCAM, nos pasaremos a *AutolevellerAE*, esto por el problema de la diferencia de alturas en la placa de cobre. *AutolevellerAE* es un software utilizado para calcular las diferencias de altura que hay en una PCB al momento de cortar las pistas mediante el sondeo de la PCB cada cierta distancia modificando en el proceso el código G dado por FlatCAM mediante los parámetros y el código G que se requiera ya sea para *LinuxCNC*, *Mach3*, *TurboCNC* o *Custom*, para este caso nos enfocaremos en el *Mach3*.

Figura 9. Espacio de trabajo en Autoleveller

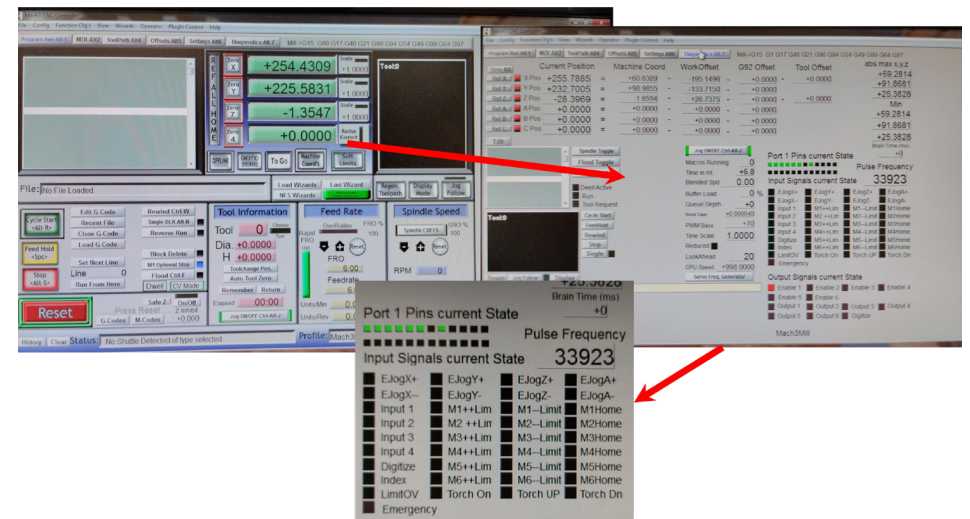


Como se ve en la figura 9, los puntos representan el sondeo donde se calculará la altura de la placa de cobre, lo que queda por hacer el guardarlo y ponerlo en el *Mach3* para iniciar el fresado de la PCB.

Figura 10. Mach3



Figura 11. Presentación de las diversas señales que de la máquina



Mach3 es un software de control de máquinas CNC utilizado como una interfaz entre el operador y la máquina CNC, brindando un control preciso y flexible sobre los movimientos y operaciones de mecanizado. Es ampliamente utilizado en la industria del mecanizado para diversas aplicaciones, como fresado, enrutamiento, grabado y más.

Lo primero que se tiene que hacer para realizar el PCB incluso antes de poner el código es la calibración de la máquina al punto 0 entre la broca y la placa de cobre, para esto, en nuestro espacio de trabajo nos iremos a la ventana *Diagnostic*, esto presionando la ventana o las teclas Alt+7, una vez ahí nos enfocaremos en la sección de *Port1 Pins current State*, para ser más precisos, en el pin 8 de izquierda a derecha y en la sección *Input Signals current State* en el indicador con el título *de Digitize*.

Lo que debemos hacer ahora es presionar la tecla de Tabulador, esto nos abrirá el panel de control manual de la máquina, para poder mover la máquina, revisamos que en nuestro espacio de trabajo el cuadro de *Reset* esté en verde, empezamos a mover nuestra herramienta acomodándola en lo que sería el punto 0 de nuestra placa de cobre.

Una vez que se muevan y se decida cuál será el punto Z en X e Y al moverse en el eje Z mientras más cerca estén se recomienda bajar el porcentaje de velocidad que está puesta en *Slow Jog Rate*, esto para evitar que la herramienta se rompa por algún movimiento brusco.

Figura 12. Calibración del punto 0 en la placa de cobre

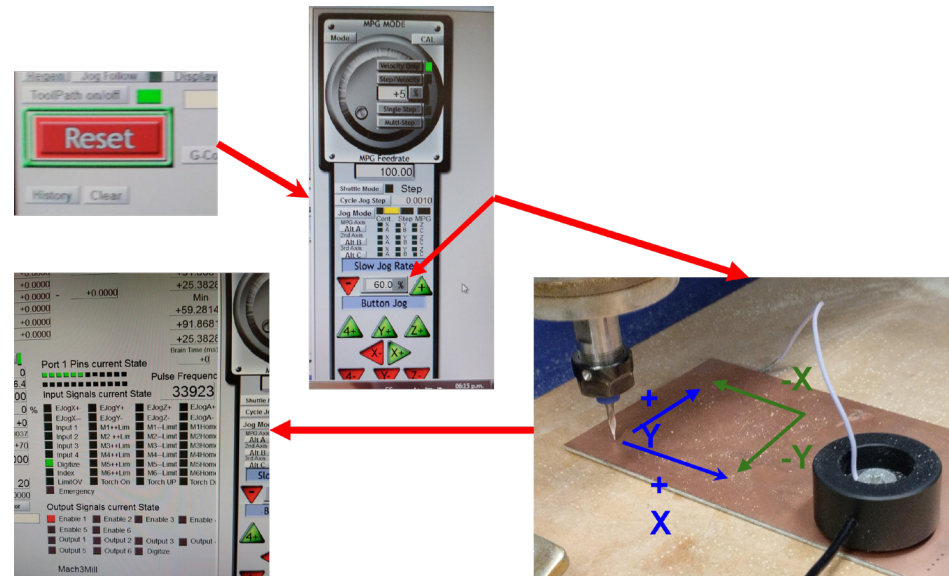


Figura 13. Prueba del mapa de altura

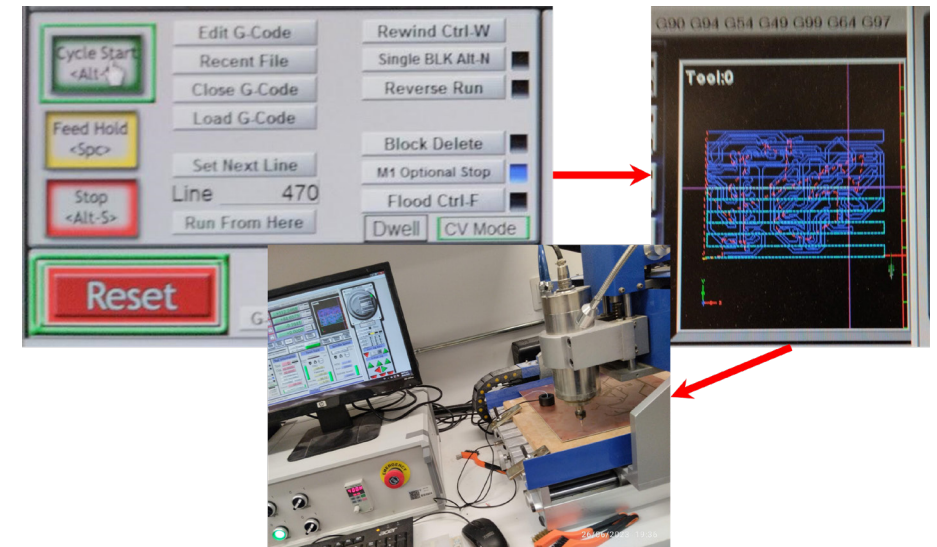
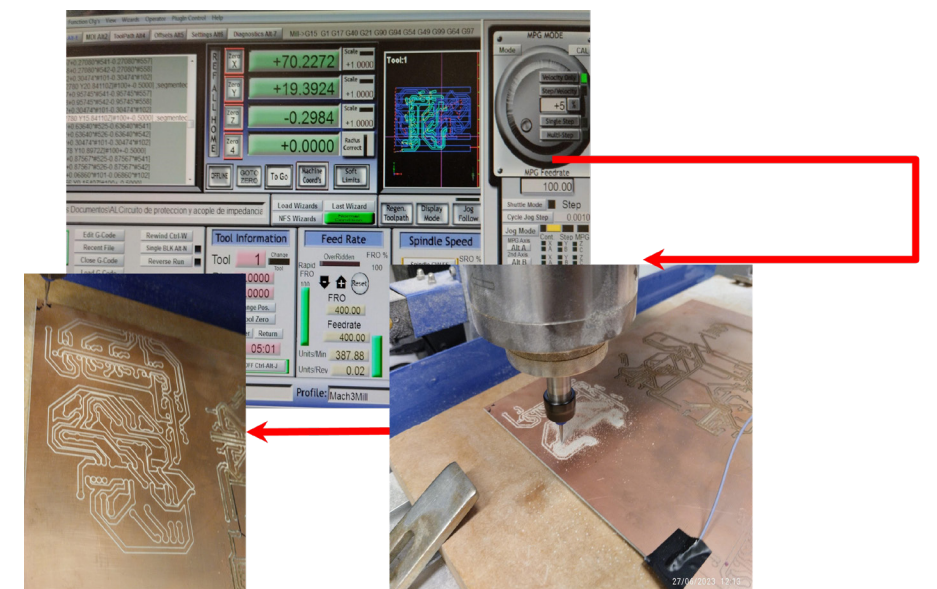


Figura 14. Fresado de las pistas

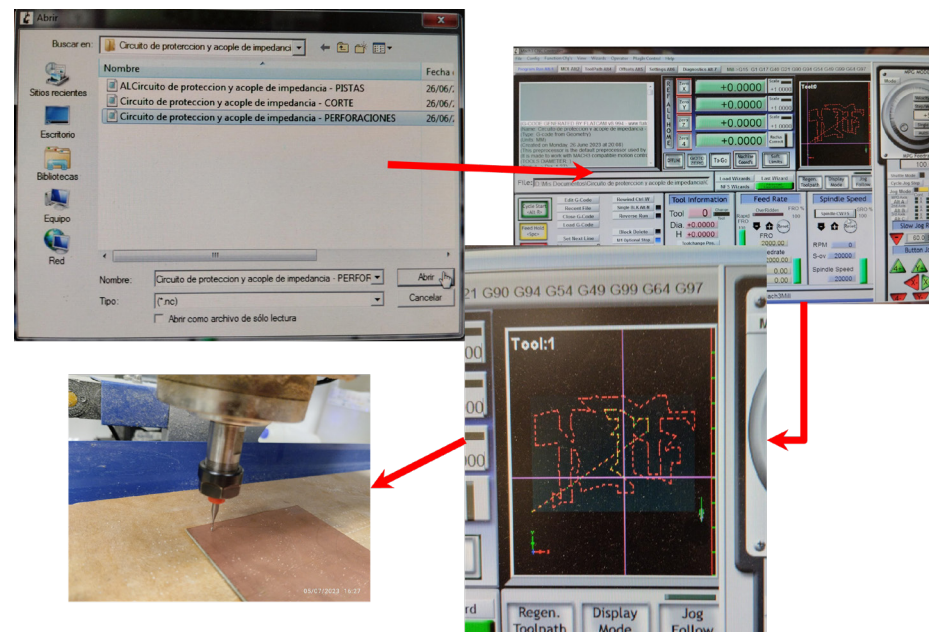
En cuanto la herramienta toque la placa de cobre el indicador de *Digitize* se encenderá y pin de la columna 8 fila 1 se apagará. Se configura el punto 0 en Zero X, Zero Y y Zero Z reiniciando cada eje para que se ponga como nuevo punto o la localización de nuestra herramienta.

Posteriormente cargamos nuestro código en el *Mach3* y comenzamos con el maquinado de las pistas mediante el código G que nos dio el *AutolevellerAE* para que primeramente se realice la prueba de alturas de la placa y posteriormente se realice el maquinado.



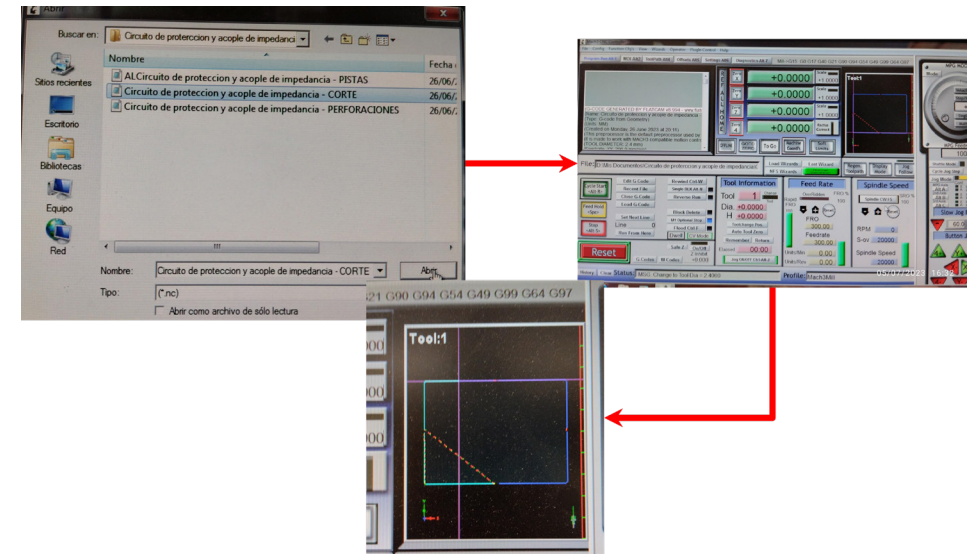
Una vez terminadas las pistas cambiaremos el programa para taladrar los orificio de los componentes, al cambiar la herramienta volveremos a calcular el punto o pero zolo del eje Z y una vez más damos inicio a el taladrado de nuestra placa

Figura 15. Perforado de la PCB



Para finalizar, y como una adición, si es que se requiere, después de la perforación de las placas se realiza un fresado en el contorno de la placa, esto en caso de que el espacio ocupado por las pistas y los componentes sea menor el tamaño de la placa en total. Por lo que nuevamente se cambia de herramienta, se vuelve a calcular el punto o y se freza el contorno de la PCB.

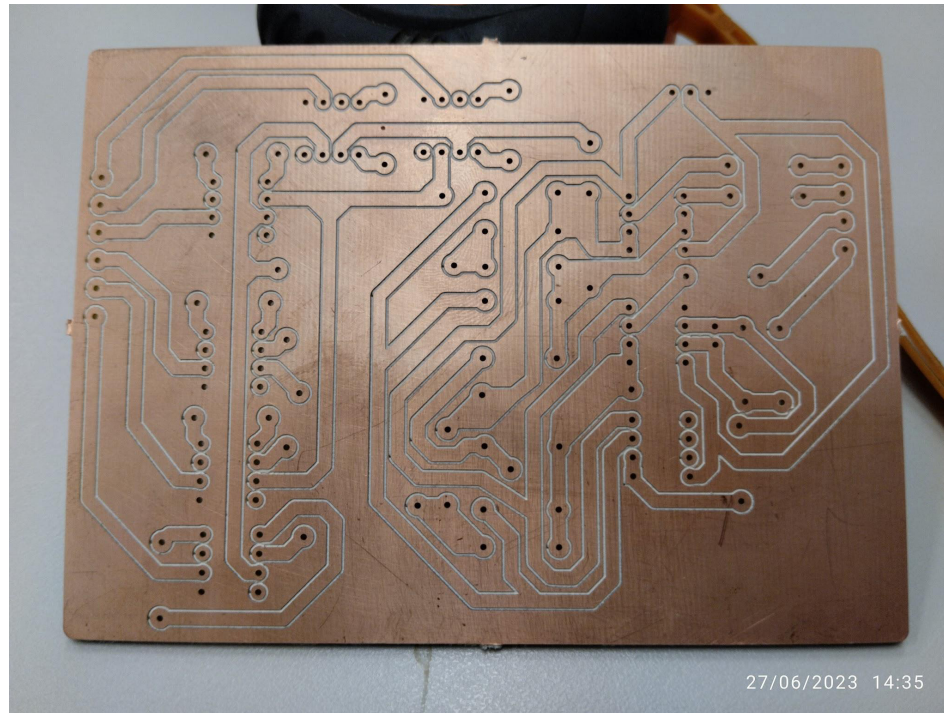
Figura 16. Perforaciones de la PCB



RESULTADOS

La innovación en la fabricación de prototipos de PCB ha marcado un hito significativo con la introducción del fresado como método primario. Este enfoque ha demostrado una precisión notable y una reducción significativa en las fallas en comparación con los métodos convencionales. Esta mejora en la precisión se traduce directamente en un avance tangible en el diseño de las PCB, permitiendo una mayor complejidad y eficiencia en su diseño. Además, este progreso se refleja en la eficacia general del proceso de creación de prototipos, donde la velocidad y la calidad se han visto notablemente optimizadas. En resumen, la adopción del fresado para la fabricación de prototipos de PCB ha impulsado un cambio positivo, promoviendo la excelencia tanto en la precisión como en la eficiencia del proceso.

Figura 17. Circuito resultante



CONCLUSIONES

La puesta a punto de un sistema cartesiano para la fabricación de prototipos en circuitos impresos por medio del fresado CNC, aunque es lenta resulta en lo ideal al buscar la precisión y eficiencia en el desarrollo de prototipos.

A futuro se puede realizar de manera más eficiente la realización de estos prototipos mediante la optimización del G-Code además se puede mejorar el proceso para la detección y corrección de imperfecciones al momento de la fabricación, explorando más opciones para la integración de herramientas de diseño de PCB para un mayor control, visualización y flujo de trabajo

REFERENCIAS

- Gilleo, K., y Murray, J. (1999). *The definitive history of the printed circuit* [Archivo PDF]. Pc Fab.
- Li, W. H. (8 de enero de 2023). *Desmitificando la fabricación de PCB: Una guía completa*. Moko Technology. <https://www.mokotechnology.com/es/pcb-fabrication/>
- Monroy, S., Carolina, L. y Reina, W. (2009). *Automatización del proceso de diseño y elaboración de circuitos impresos*. Universidad de San Buenaventura.
- Suárez, L. (15 de diciembre de 2020). *FABRICACIÓN DE PCB'S*. *AG Electronica Blog*. <https://agelectronica.blog/2020/12/15/fabricacion-de-pcbs/>
- Valdivieso, M. y Negrete, T. (2017). *Diseño e implementación de un prototipo de sistema de control numérico computarizado para la elaboración de circuitos impresos en baquelita*. Universidad Politécnica Salesiana.
- Vanfleteren, J., Gonzalez, M., Hsu, Y., Vervust, T., De Wolf, I., y Jablonski, M. (2012). Printed circuit board technology inspired stretchable circuits. *Materials Research Society*, 3 (37) 254-260 <https://doi.org/10.1557/mrs.2012.48>

Índice

PRÓLOGO	
Gloria Angélica Hernández Obledo	11
ANÁLISIS IN SILICO DE LAS PROPIEDADES INTRAMOLECULARES E INTERMOLECULARES DE INTERFACES DONADOR-ACEPTOR EN CELDAS SOLARES ORGÁNICAS: EL CASO DE LOS SISTEMAS BO-5F Y BO-5CL	
Jatziri Guadalupe Noriega Rodríguez Alessandro Romo Gutiérrez	15
ANÁLISIS IN SILICO DE LAS PROPIEDADES INTRAMOLECULARES E INTERMOLECULARES DE INTERFACES DONADOR-ACEPTOR EN CELDAS SOLARES ORGÁNICAS: EL CASO DE LOS SISTEMAS BO-7F Y BO-7CL	
Pamela Jaqueline Vargas Moreno Alessandro Romo Gutiérrez	25
DESARROLLO DE UNA APLICACIÓN EN PYTHON PARA LA SELECCIÓN Y PROCESADO DE INFORMACIÓN ARROJADA EN CÁLCULOS DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA	
Rafael Becerra Aguayo Zuriel Natanael Cisneros García	35
EQUIPOS Y PRÁCTICAS DE LABORATORIO DIDÁCTICOS PARA FÍSICA E INGENIERÍA	
María Fernanda Valadez Sánchez María del Rayo Angeles Aparicio Fernández	45

INTERACCIÓN LIGANDO-PROTEÍNA POR MOLECULAR DOCKING: MECANISMO DE ACCIÓN DE DIVERSOS INHIBIDORES SOBRE LA ESTRUCTURA DE LA TIROSINASA DE MANZANA LATENTE (MDPP01) Valeria Silva Villalobos Zuriel Natanael Cisneros García	55
MODELADO DE MOLÉCULAS UTILIZADAS EN CELDAS SOLARES ORGÁNICAS Carolina Larios Soto Jaime Gustavo Rodríguez Zaval	67
DISEÑO DE UN AGENTE INTELIGENTE APLICADO EN LA LIMPIEZA, ANÁLISIS Y REPRESENTACIÓN DE BASES DE DATOS BIBLIOGRÁFICAS Juan Alberto Veloz Romo Jesús Ricardo Sevilla Escoboza	83
APROVECHAMIENTO DE LOS RESIDUOS FINOS DE POLIESTIRENO EXPANDIDO PARA SU APLICACIÓN COMO ADSORBENTE DE FÁRMACOS DE USO COMÚN Stephania Yareth Estrada Alcaráz Dafne Lizbeth Romo Cortez Egla Yareth Bivián Castro	95
DENSIFICACIÓN DE MATERIALES COMPOSITOS DE UNA MATRIZ DE POLIESTIRENO CON ARREGLOS METAL-ORGÁNICOS Luis Gabriel Gutiérrez Vera Egla Yareth Bivián Castro	107
ESTUDIO TEÓRICO DE MOLÉCULAS DE INTERÉS BIOLÓGICO Christian Guillermo Noriega Collazo Francisco José Tenorio Rangel	121

EVALUACIÓN DEL EFECTO ANTIBACTERIAL FRENTE ESCHERICHIA COLI DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA SINTETIZADA DE FORMA ECOLÓGICA Valeria Guadalupe Hernández Flores César Eulogio Ortega Cardona	133
DISPOSICIÓN DEL DOCENTE DEL CULAGOS HACIA LA INCLUSIÓN Y LA DISCAPACIDAD Emmanuel Estrada Ramírez María del Pilar Ramírez Martínez	145
RENDIMIENTO DE ACEITE ESENCIAL DE LAVANDA UTILIZANDO DIFERENTES MÉTODOS DE EXTRACCIÓN Jonathan Hernandez Mejía Alexa del Rosario Aguiñaga Guerrero Nicolás Ulloa Gómez Xochitl Aparicio Fernández	159
‘¡DON BETO! YA TENEMOS NUEVA CARRETERA’ LA COMUNICACIÓN SOCIAL Y EL PROGRAMA NACIONAL SOLIDARIDAD EN MÉXICO A FINES DEL SIGLO XX Judith Gómez González Cecilia Cordova Ortega José Guillermo Celis Romero	175
GAMIFICANDO LA LENGUA DE SEÑAS EN UN PROCESO DE INCLUSIÓN Sergio Mikhail Franco Ramírez Auria Lucía Jiménez Gutiérrez Luis Javier López Reyes Diana Costilla López	187

ANÁLISIS DE MICROBIOTA RRNA 16S CON EL USO DE HERRAMIENTAS BIOINFORMÁTICAS COMO DADA2 EN R

Saulo Heriberto Aranda Trejo
Haiku Daniel De Jesús Gómez Velázquez 197

APROVECHAMIENTO DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES COMO PREBIÓTICOS (VINAZA, INULINA, ORUJO Y JAMAICA) PARA ESTIMULAR EL CRECIMIENTO DEL PROBIÓTICO BPL-1 EN LA ELABORACIÓN DEL YOGURT

Joseline Ibarra Clemente
Miguel Ángel Montes Rodríguez
Joel de Jesús Barba Franco 211

EVALUACIÓN DEL EFECTO DE LA ADICIÓN DE ACEITES ESENCIALES DE CANELA (CINNAMOMUM VERUM) Y MANZANILLA (*MATRICARIA CHAMOMILLA L.*) EN EL YOGURT SOBRE PARÁMETROS FÍSICOQUÍMICOS Y MICROBIOLÓGICOS

Lucero Márquez González
Miriam Ximena Carmona Figueroa
Joel de Jesús Barba Franco
Xochitl Aparicio Fernández 225

PROCESOS CONTAMINANTES

Uriel Ramos Rocha
Jazmín Sandoval Reyes
Bertha Alicia Arce Chávez 239

ANÁLISIS DE REDES NEURONALES CONVOLUCIONALES PARA EL SEGUIMIENTO DE OBJETOS MÓVILES

José Fernando Delabra Deloya
Pedro Yael Calderón Enciso
Damaris Cano Robledo
Miguel Mora González 259

ESTIMACIÓN DE LA TASA METABÓLICA EN BOVEDEROS

Ángel De Jesús Torres Padilla
Jonathan Adair Mora Ramos
Mario Alberto Villegas Romero 277

EVALUACIÓN DE LA PERCEPCIÓN DE LA CARGA DE TRABAJO DURANTE LA SIMULACIÓN DE LAS ACTIVIDADES DE BOVEDEROS

Maximiliano Barba Ibarra
Anny Muñoz Romo
Mario Alberto Villegas Romero 291

HABITACIÓN INTELIGENTE

María José González Rangel
Manuel de Jesús Bañuelos Higuera
Tania Aglae Ramírez del Real
Miguel Mora González 305

EXPLORANDO LA CIENCIA DE DATOS: UNA MIRADA SÓLIDA DESDE LA LITERATURA, ALGORITMOS Y REFLEXIONES

Sadan Josué López Morales
Mario Ignacio González Silva
Ricardo González Silva 321

PUESTA A PUNTO DE UN SISTEMA CARTESIANO PARA LA FABRICACIÓN DE PROTOTIPOS EN CIRCUITOS IMPRESOS

Luis Germán Pérez Hernández
Jesús Ricardo Sevilla Escoboza 349