

# Handbook T-II

Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente

**BENAVIDES, Olena**

**FLORES-GIL, Aarón**

*Coordinadores*

**ECORFAN®**

**ECORFAN®**

**Coordinadores**

BENAVIDES, Olena. PhD

FLORES-GIL, Aarón. PhD

**Editor en Jefe**

VARGAS-DELGADO, Oscar. PhD

**Directora Ejecutiva**

RAMOS-ESCAMILLA, María. PhD

**Director Editorial**

PERALTA-CASTRO, Enrique. MSc

**Diseñador Web**

ESCAMILLA-BOUCHAN, Imelda. PhD

**Diagramador Web**

LUNA-SOTO, Vladimir. PhD

**Asistente Editorial**

SORIANO-VELASCO, Jesus. BsC

**Filóloga**

RAMOS-ARANCIBIA, Alejandra. BsC

ISBN: 978-607-8695-94-2

Sello Editorial ECORFAN: 607-8695

Número de Control HIMAMA: 2022-010

Clasificación HIMAMA (2022): 301222-0010

**©ECORFAN-México, S.C.**

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

## **Handbooks**

### **Definición de Handbooks**

#### **Objetivos Científicos**

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

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

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

#### **Alcances, Cobertura y Audiencia**

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

## **Consejo Editorial**

ROCHA - RANGEL, Enrique. PhD  
Oak Ridge National Laboratory

CARBAJAL - DE LA TORRE, Georgina. PhD  
Université des Sciences et Technologies de Lille

GUZMÁN - ARENAS, Adolfo. PhD  
Institute of Technology

CASTILLO - TÉLLEZ, Beatriz. PhD  
University of La Rochelle

FERNANDEZ - ZAYAS, José Luis. PhD  
University of Bristol

DECTOR - ESPINOZA, Andrés. PhD  
Centro de Microelectrónica de Barcelona

TELOXA - REYES, Julio. PhD  
Advanced Technology Center

HERNÁNDEZ - PRIETO, María de Lourdes. PhD  
Universidad Gestalt

CENDEJAS - VALDEZ, José Luis. PhD  
Universidad Politécnica de Madrid

HERNANDEZ - ESCOBEDO, Quetzalcoatl Cruz. PhD  
Universidad Central del Ecuador

## **Comité Arbitral**

URBINA - NAJERA, Argelia Berenice. PhD  
Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla

PEREZ - ORNELAS, Felicitas. PhD  
Universidad Autónoma de Baja California

CASTRO - ENCISO, Salvador Fernando. PhD  
Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla

CASTAÑÓN - PUGA, Manuel. PhD  
Universidad Autónoma de Baja California

BAUTISTA - SANTOS, Horacio. PhD  
Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla

GONZÁLEZ - REYNA, Sheila Esmeralda. PhD  
Instituto Tecnológico Superior de Irapuato

RUELAS - SANTOYO, Edgar Augusto. PhD  
Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas

HERNÁNDEZ - GÓMEZ, Víctor Hugo. PhD  
Universidad Nacional Autónoma de México

OLVERA - MEJÍA, Yair Félix. PhD  
Instituto Politécnico Nacional

CUAYA - SIMBRO, German. PhD  
Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica

## **Cesión de Derechos**

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

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

## **Declaración de Autoría**

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

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

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

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

## **Detección de Plagio**

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

## **Proceso de Arbitraje**

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

# **ECORFAN Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente**

---

## **Volumen II**

---

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

**Benavides, Olena  
Flores-Gil, Aarón**

Coordinadores

# Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente T-II *Handbooks*

Universidad Autónoma del Carmen

Diciembre, 2022

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.1.100

## Introducción

El Handbook “Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente T-II” es un product académico del 4to Coloquio Estudiantil de Maestría organizado por los integrantes y estudiantes de la Maestría en Ingeniería de Materiales y Energía de la Universidad Autónoma del Carmen. En este evento participaron estudiantes de posgrado de la Universidad Autónoma del Carmen, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Universidad Autónoma del Estado de Morelos y el Centro de Investigación Científica de Yucatán - Unidad de Energía Renovable.

Hoy en día los esfuerzos realizados en el desarrollo de nuevos materiales para ingeniería se han diversificado en diferentes ramas, enfatizando en este coloquio los aspectos ambientales, por lo que las investigaciones contenidas en los dos volúmenes de este handbook están enfocadas al desarrollo de materiales aplicados a la Ingeniería y al Medio Ambiente.

Como primer artículo *Ceballos, Ordóñez y Sierra* realizan un análisis de los fenómenos de transporte de masa y energía utilizando un modelo 3D no-isotérmico multifásico de una PEMFC mono-canal. Se empleó el código abierto OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) para realizar el análisis computacional de la dinámica de fluidos (CFD) del caso de estudio

*Vázquez, Patiño, Flores y Figueroa* producen hidrógeno ( $H_2$ ) a partir de la activación mecánica de la aleación Al-20% peso Fe, es decir, intermetálica  $Al_{13}Fe_4$  sometida en un medio de agua destilada durante 24 horas.

*Aguilar, Montalvo, Arias y Ramírez* comparan las eficiencias del catalizador comercial Oxido de titanio Degussa P-25 (CAT1) y el óxido de titanio sintetizado con un precursor alcóxido (CAT2) para la remoción de ambas moléculas orgánicas (ACET y NPEG), por procesos de fotocatalísis.

*Fuentes, Alarcón, Lorenzana y Gadea* utilizaron sedimentos provenientes de un jagüey de una localidad del estado de Morelos, México, en un dispositivo de celda de combustible microbiana béntica a escala laboratorio. La investigación se efectuó en tres etapas, la primera consistió en la recolección de los sedimentos y el ensamble de la celda, en la segunda etapa se monitoreó la aclimatación del dispositivo

*Sánchez, Rodríguez, Vázquez y Palacios* pretenden utilizar la medición de señales vibratorias con solo acelerómetros para distinguir la falla entre baleros y/o desbalance empleando un enfoque no lineal basado en redes neuronales aplicado a un sistema rotodinámico, el cual será entrenado para diversas condiciones de operación libre de falla y bajo falla.

*Huchin, Figueroa, Porcayo y Sierra* obtienen extractos de las hojas de la planta *Coccoloba uvifera* y se caracterizan mediante pruebas fitoquímica y espectroscópica. Los extractos se obtuvieron mediante el proceso de maceración empleando como solventes el acetato de etilo, acetona, etanol, metanol y hexano

*Sánchez, Figueroa, Sierra y Patiño* llevan a cabo la caracterización de tres electrolizadores tipo PEM en monocelda con distintos campos de flujo: pines cuadrados, pines circulares y circulares en zigzag. Asimismo, se determinó la cantidad de hidrógeno producido para cada diseño a diferentes potenciales, tiempos y temperaturas

*Ramírez, Benítez, Anguebes y Montalvo* utilizaron las bacterias: *Serratia marcescens* y *Microbacterium nematophilum* en forma de consorcio bacteriano, que se inoculó en un medio mineral, utilizando petróleo crudo medio (22,4 °API) al 1% en volumen como única fuente de carbono. Se realizaron medidas de Espectroscopía Infrarroja (FT-IR) a diferentes intervalos de tiempo de contacto (7, 14 y 21 días) para identificar los grupos de hidrocarburos degradados, siendo éstos en mayor proporción los de la región de hidrocarburos alifáticos frente a los aromáticos.

*Benavides, Olena  
Flores-Gil, Aarón*

*Coordinadores*

## Contenido

		Página
1	<b>Simulación numérica de una celda tipo PEM: Estudio teórico de fenómenos de transporte en el cátodo</b> CEBALLOS-PÉREZ, José, ORDÓÑEZ-LÓPEZ, Luis y SIERRA-GRAJEDA, Juan	1-9
2	<b>Producción de hidrógeno por activación mecánica de la aleación intermetálica <math>Al_{13}Fe_4</math></b> VAZQUEZ-ESCUADERO, Agustín, PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal, FLORES-CHAN, José Enrique y FIGUEROA-RAMÍREZ, Sandra Jazmín	10-17
3	<b>La fotocatalisis una opción de tratamiento para la eliminación de fármacos y disruptores endócrinos</b> AGUILAR-UCAN, Claudia Alejandra, MONTALVO-ROMERO, Carlos, ARIAS-MATEO, María y RAMÍREZ- ELIAS, Miguel Angel	18-28
4	<b>Empleo de sedimentos de jagüey en una celda de combustible microbiana béntica para la generación de electricidad</b> FUENTES-ALBARRÁN, María del Carmen, ALARCÓN-HERNÁNDEZ Fidel Benjamín, LORENZANA-RAMÍREZ Ana Fernanda y GADEA-PACHECO José Luis	29-35
5	<b>Propuesta para detección de vibraciones y/o desbalance en un sistema rotodinámico a partir de redes neuronales</b> SANCHEZ-ARROYO, Ian Arturo, RODRIGUEZ-BLANCO, Marco Antonio, VAZQUEZ-AVILA José Luis y PALACIOS-GONGORA, Iris Susana	36-48
6	<b>Caracterización fitoquímica y espectroscópica de extractos de las hojas de la <i>Coccoloba uvifera</i></b> HUCHIN-CHAN, Nancy del Carmen, FIGUEROA-RAMÍREZ, Sandra Jazmín, PORCAYO-CALDERÓN, Jesús y SIERRA-GRAJEDA, Juan Manuel Tadeo	49-58
7	<b>Caracterización de electrolizadores con diferentes campos de flujo</b> SÁNCHEZ-MARTÍNEZ, Víctor Alberto, FIGUEROA-RAMÍREZ, Sandra Jazmín, SIERRA-GRAJEDA, Juan Manuel Tadeo y PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal	59-69
8	<b>Degradación de hidrocarburos alifáticos de petróleo crudo en medio mineral utilizando un consorcio bacteriano</b> RAMÍREZ-ELIAS, Miguel, BENITEZ-PINEDA, Paulo, ANGUEBES-FRANSESCHI, Francisco y MONTALVO-ROMERO, Carlos	70-80

## Capítulo 1 Simulación numérica de una celda tipo PEM: Estudio teórico de fenómenos de transporte en el cátodo

### Chapter 1 Numerical simulation of a PEM fuel cell: Theoretical study of transport phenomena at the cathode

CEBALLOS-PÉREZ, José<sup>1</sup>, ORDÓÑEZ-LÓPEZ<sup>1\*</sup>, Luis y SIERRA-GRAJEDA, Juan<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Centro de Investigación Científica de Yucatán, Unidad de Energía Renovable, Parque Científico Tecnológico de Yucatán, Carretera Sierra Papacal – Chuburná Puerto, Km 5, Sierra Papacal, Mérida, Yucatán, México.*

<sup>2</sup>*Universidad Autónoma del Carmen, Campus III, Facultad de Ingeniería, Avenida Central S/N, Esq. con Fracc. Mundo Maya, C.P. 24115, Ciudad del Carmen, Campeche, México.*

ID 1<sup>er</sup> Autor: *José, Ceballos-Pérez* / **ORC ID:** 0000-0001-7529-0346, **CVU CONACYT ID:** 928198

ID 1<sup>er</sup> Coautor: *Luis, Ordóñez-López* / **ORC ID:** 0000-0003-1110-1934, **CVU CONACYT ID:** 43804

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *Juan, Sierra-Grajeda* / **ORC ID:** 0000-0002-0565-6450, **CVU CONACYT ID:** 219284

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.1.9

J. Ceballos, L. Ordóñez y J. Sierra

\* lcol@cicy.mx

O. Benavides & A. Flores (VV. AA.). Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente. Handbooks- TII- ©ECORFAN-Mexico, 2022.

## Resumen

Las celdas de combustibles de intercambio protónico (PEMFC) son dispositivos que pueden convertir energía química en eléctrica directamente generando como productos agua y calor. Por lo tanto, las PEMFC son una alternativa limpia para la generación de electricidad. Para optimizar su desempeño, es necesario comprender los fenómenos de transporte que rigen su funcionamiento. Por lo tanto, en este trabajo se realizó un análisis de los fenómenos de transporte de masa y energía utilizando un modelo 3D no-isotérmico multifásico de una PEMFC mono-canal. Se empleó el código abierto OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) para realizar el análisis computacional de la dinámica de fluidos (CFD) del caso de estudio. Los resultados muestran que las zonas de formación de agua se encuentran debajo de los espacios intercostales de los platos bipolares (BP). También, que el aumento de la tasa de condensación de agua presenta como restricción el suministro de reactivos en los sitios catalíticos localizados en el medio poroso, lo que impacta en el rendimiento global de la celda de combustible.

### **PEMFC, OpenFOAM, Transporte de masa, Formación de agua.**

#### **Abstract**

Proton exchange fuel cells (PEMFCs) are devices that can convert chemical energy into electrical energy directly by generating water and heat as products. Therefore, they are considered a clean energy alternative in electricity generation. To optimize their performance, it is necessary to understand the transport phenomena that govern their operation. Therefore, in this work, an analysis of mass and energy transport phenomena was performed using a 3D non-isothermal multiphase model of a single-channel PEMFC. The open source OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) was used to compute the computational fluid dynamics (CFD) in the case study. The results show that the water-forming zones are located below the intercostal spaces of the bipolar plates (BP). Also, the increased water condensation rate restricts the supply of reactants to the catalytic sites of the porous media and impacts the overall performance of the fuel cell.

### **PEMFC, OpenFOAM, mass transport, water formation.**

#### **1. Introducción**

Las PEMFC son dispositivos que puede convertir directamente la energía química de un combustible en electricidad y generando como subproductos agua y calor. Por esto, las celdas de combustible son una alternativa limpia que consume oxígeno en el lado del cátodo e hidrógeno en el lado del ánodo, Las reacciones electroquímicas se realizan en la capa catalítica de cada electrodo. Por lo tanto, el rendimiento está notablemente relacionado con la tasa de suministro de reactivos a la capa catalizadora y la cantidad de agua presente en los componentes de la celda.

Por esta razón, se investigan los mecanismos de transporte para el agua en lado del cátodo,, ya que la formación de agua afecta al rendimiento de la celda de combustible en diferentes maneras (Esbo et al., 2020). Por ejemplo, se necesita una cantidad de agua suficiente para garantizar la hidratación de la membrana y así tener una conductividad iónica suficiente. Además, se debe eliminar el exceso de agua para evitar la inundación de los medios porosos y canales de flujo (Jiao et al., 2021).

Las simulaciones numéricas se convierten en una herramienta útil para analizar los mecanismos de transporte, evitando experimentos costosos, complicados y que requieren mucho tiempo, además de que las mediciones a esa escala son difíciles de establecer. El comportamiento del agua líquida fue analizado por Wang et al. (Wang & Wang, 2006) utilizando un modelo bifásico en el que los resultados numéricos revelaron que la fase de vapor mejora la eliminación del agua. Además, el agua líquida se acumula rápidamente en la entrada, seguida de un lento aumento aguas abajo en condiciones de entrada de humidificación total (Wang et al., 2008). Chaozhong (Chaozhong, 2012) analizaron la saturación inmóvil, asumiendo un medio poroso estructurado de 1.0, una suposición de flujo de niebla y la aproximación de la ley de Darcy para los canales de flujo. Los resultados muestran que despreciar la inundación de los canales de flujo de gas conduce a una predicción incorrecta de la distribución del agua líquida en las capas difusoras y a una sobreestimación del rendimiento de la celda. Esmaili et al. (Esmaili et al., 2020) utilizaron un diagnóstico de la gestión del agua basado en un modelo a diferentes densidades de corriente.

El resultado muestra que la caída de presión bifásica puede considerarse un criterio adecuado para el diagnóstico de la gestión del agua en condiciones de entrada completamente humidificado. Lee (Lee et al., 2021) utilizaron el método de Boltzmann para simular el proceso de intrusión tridimensional de agua líquida en la capa difusora para investigar la influencia de la orientación de las fibras en el transporte de agua líquida. Llegaron a la conclusión de que la orientación de la fibra afectaba significativamente al patrón de invasión del líquido en la GDL por la forma y distribución de los poros.

En este estudio, investigamos la distribución de la saturación de agua líquida en el lado del cátodo utilizando un modelo multifase 3D no isotérmico de una PEMFC. Utilizamos un modelo de difusión efectiva basado en las capas apiladas en forma de fibras (modelo de Tomadakis-Sotirchos) y un código abierto para computar los cálculos de volumen finito. Para identificar la presencia de agua líquida, presentamos la saturación, el vapor de agua, la presión de saturación y la humedad relativa.

## 2. Métodos

### 2.1 Ecuaciones gobernantes

La Tabla 1 muestra las ecuaciones gobernantes y términos fuentes. El modelado del flujo a través de la celda utiliza las ecuaciones de Navier-Stokes y considera el medio poroso como isotrópico. El término fuente en la ecuación de momento pertenece a la ley de Darcy para representar las fuerzas de superficie de las zonas porosas.

En la ecuación de continuidad (Eq. 1)  $\rho_g$  es la densidad del fluido,  $\vec{U}_g$  es el vector velocidad y  $S_l$  es el término fuente debido al cambio de fase, donde  $C_r$  es la tasa de condensación,  $\varepsilon$  la porosidad,  $s$  la saturación de agua líquida,  $x_{wv}$  la fracción de masa del vapor de agua,  $p_{sat}$  la presión de saturación,  $R$  la constante de gases ideales, y  $M_{H_2O}$  el peso molecular del agua. En la ecuación de momento (Eq. 3)  $p_g$ ,  $\mu_g$ , and  $S_M$  representan el gradiente de presión del gas, la viscosidad dinámica, y el término fuente de acuerdo a la ley de Darcy.  $S_M$  es la resistencia de Darcy en el medio poroso (Quan & Lai, 2007), donde  $K_g$  es la permeabilidad de la fase gas.

En la ecuación de transporte de especies químicas (Eq. 5)  $y_i$  and  $D_g^{eff}$  son la fracción de masa de la especie  $i$  y el coeficiente de difusión efectivo de la fase gaseosa, respectivamente. En la ecuación de transporte de agua líquida (Eq. 9) los términos  $D_l$  definen la difusividad del agua líquida, donde  $\rho_l$ ,  $k_l$  and  $\mu_l$  representan la densidad del fluido, la conductividad térmica, y la viscosidad dinámica del agua líquida, respectivamente. Y finalmente,  $p_c$  es la presión capilar.

En la ecuación de energía (Eq. 6)  $\rho_{mix}$ ,  $C_{p_{mix}}$ ,  $k_{mix}$ , definen la densidad de la mezcla gaseosa, así como la capacidad calorífica y la conductividad térmica de la misma, respectivamente.  $T$  es la temperatura.  $S_E^{reac}$  y  $S_E^{PC}$  son el término fuente debido al calor liberado por la reacción electroquímica y el cambio de fase del agua, respectivamente. Donde  $\delta_{MEA}$  es el espesor del ensamble membrana-electrodo,  $\eta_{act}$  son las pérdidas por activación,  $n_i$  el número de electrones transferidos,  $F$  la constante de Faraday and  $h_{mfg}$  es el calor latente.

### 2.2 Ecuaciones auxiliares

La Tabla 2 muestra las ecuaciones auxiliares que son utilizadas para obtener información de la distribución del agua líquida. Para la ecuación de Nernst (Eq. 11),  $E$  es el potencial de Nernst,  $E_0$  es el potencial de equilibrio,  $R$  es la constante de gases ideales,  $T$  es la temperatura,  $F$  la constante de Faraday and  $Q_{ac}$  es el cociente de reacción de las especies químicas, donde  $[P_j]$  y  $[R_i]$  representan la concentración de productos  $j$  y reactantes  $i$ , respectivamente; y  $b_j$  y  $a_i$  son sus respectivos coeficientes estequiométricos. En el modelo de Tomadakis-Sotirchos (Eq. 16) (Tomadakis & Sotirchos, 1993),  $D_i^{eff}$  y  $D_i^{bulk}$  denotan los coeficientes de difusión efectivos y totales, respectivamente; y  $n$  es el factor de tortuosidad debido a la saturación.

**Tabla 1** Ecuaciones gobernantes

Descripción	Ecuación	
Ecuación de continuidad	$\nabla \cdot (\rho_g \vec{U}_g) = -S_l$	(1)
Término fuente de la ecuación de continuidad debido al cambio de fase	$S_l = -C_r \frac{\varepsilon(1-s)(x_{wv}p_g - p_{sat})}{RT} M_{H_2O}$	(2)
Ecuación de momento	$\nabla \cdot (\rho_g \vec{U}_g \vec{U}_g) = -\nabla p_g + \nabla \cdot (\mu_g \nabla \vec{U}_g) + S_M$	(3)
Término fuente de ley de Darcy	$S_M = -\frac{\mu_g \vec{U}_g}{K_g}$	(4)
Ecuación de transporte de especies químicas	$\nabla \cdot (\rho_g \vec{U}_g y_i) = (\nabla \cdot \rho_g D_g^{eff} \nabla y_i)$	(5)
Ecuación de energía	$\nabla \cdot (\rho_{mix} C_{p,mix} \vec{U}_g T) = \nabla \cdot (k_{mix} \nabla T) + S_E^{react} + S_E^{PC}$	(6)
Término fuente de liberación de calor en la ecuación de energía debida a las reacciones electroquímicas	$S_E^{react} = \frac{1}{\delta_{MEA}} \left( \eta_{act} - \frac{T \nabla S}{n_i F} \right)$	(7)
Término fuente de cambio de fase del agua en la ecuación de energía	$S_E^{PC} = S_l h_{mfg}$	(8)
Ecuación de transporte de agua líquida	$\nabla \cdot (\rho_l D_l \nabla s) - \nabla \cdot (\rho_g \vec{U}_g s) = S_l$	(9)
Difusividad del agua líquida	$D_l = \frac{\rho_l k_l}{\mu_l} \frac{\partial p_c}{\partial s}$	(10)

### 2.3 Dominio computacional

Se consideró como dominio computacional una celda de combustible tipo PEM de un solo canal. Incluye una membrana (electrolito polimérico sólido), placas monopolares anódica y catódica, capas difusoras de gas, capas catalizadoras y canales de flujo de gas (GFC). El presente modelo supone una celda de combustible de flujo multifásico no isotérmico en 3D, donde se supone que los gases son ideales e incompresibles, y el flujo es laminar.

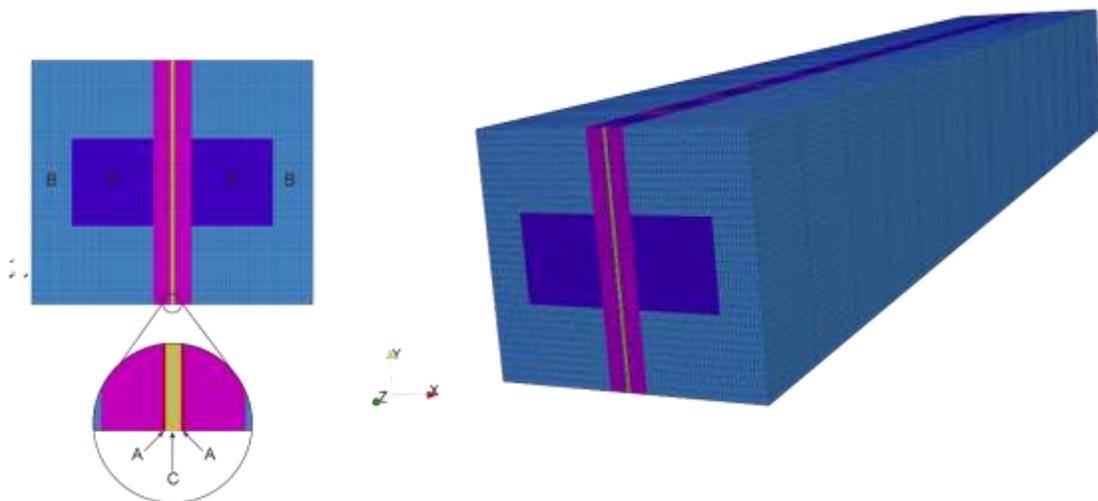
**Tabla 2** Ecuaciones auxiliares del modelo

Description	Equation	
Ecuación de Nernst	$E = E_0 + \frac{RT}{n_i F} \ln Q_{ac}$	(11)
Tasa de actividad de las especies químicas	$Q_{ac} = \frac{\prod_j [P_j]^{b_j}}{\prod_i [R_i]^{a_i}}$	(12)
Humedad relativa de la mezcla de gases	$RH = \frac{p_{wv}}{p_{sat}}$	(13)
Presión de vapor de agua	$p_{wv} = x_{wv} \times p_g$	(14)
Presión de saturación	$\log p_{sat} = -2.1794 + 0.02953(T - 273.15) - 9.1837 \times 10^{-5}(T - 273.15)^2 + 1.4454 \times 10^{-7}(T - 273.15)^3$	(15)
Modelo de difusión efectiva de Tomadakis-Sotirchos	$D_i^{eff} = \left( \frac{\varepsilon - 0.037}{1 - 0.037} \right)^{0.661} D_i^{bulk} (1 - s)^n$	(16)

Las propiedades termofísicas de los materiales son constantes, isotrópicas y homogéneas. El flujo catódico contiene agua en fase líquida y vapor. Las reacciones se producen en una única interfaz entre el electrodo catódico y una membrana totalmente hidratada. Se desprecia el calentamiento óhmico y el potencial eléctrico es constante debido a la alta conductividad del material de la placa monopolar. Se aplican condiciones adiabáticas en las paredes exteriores de toda la pila. La Fig. 1 muestra el modelo de la celda de combustible y sus principales componentes. La zona A representa la región del fluido donde se resuelven las ecuaciones de continuidad, momento, transporte de especies químicas, energía y transporte de agua líquida (Ecs. 1, 3, 5, 6, 9). La zona B define la región de los sólidos donde se resuelve la ecuación de energía (Ec. 6). La electroquímica (E. 11) se resuelve en la zona C.

Las variables que hay que resolver en la región del fluido son la densidad, la velocidad, la presión, la fracción de masa de las especies químicas y la temperatura que se resuelven en la zona del sólido. La Tabla 3 resume la información de la geometría de la celda de combustible y los parámetros operativos.

**Figura 1** Esquema de la celda de combustible de un canal. Zona A: Región sólida, Zona B: Región fluida, Zona C: Conjunto electrodo-membrana



### 3.4 Solución numérica

Se utilizó OpenFOAM, una herramienta de código abierto en C++, para discretizar y resolver las ecuaciones gobernantes con el método de volúmenes finitos. Se aplicó el algoritmo PISO para el acoplamiento entre el campo de presiones y velocidades. Se utilizó el método PBiCG para encontrar la convergencia en la ecuación de energía y PBiCGStab para las demás variables (presión, velocidad, saturación, fracciones masa). Ambos métodos utilizaron un preconditionador DILU. Para todas las variables, el criterio de convergencia fue un residuo de  $1 \times 10^{-9}$ . Después de la inicialización del programa, el modelo comienza un ciclo de iteración asignando la temperatura global a las regiones de aire y combustible. Las ecuaciones de presión y de momento se resolvieron en los dominios de los fluidos con las densidades de los fluidos calculadas. Se calculó la difusividad de masa en los fluidos, se resolvieron las fracciones de masa de las especies químicas y se calculó la electroquímica. Los campos de datos termofísicos y de velocidad se mapearon en una malla global, y se resolvió la ecuación de energía para la temperatura global. Todos estos procesos se iteraron hasta que convergieron.

### 3. Resultados y discusiones

Para la validación del modelo, comparamos los resultados del modelo numérico con los datos experimentales de Chugh (Chugh et al., 2020). Ellos obtuvieron una curva de polarización de un *stack* de celdas, pero en este estudio, consideramos el rendimiento de una sola celda. Las condiciones de funcionamiento de las curvas simuladas para la celda son Temperatura = 80 °C, presión = 0,25 Mpa, HR = 100% (tanto para el lado del ánodo como del cátodo), coeficientes estequiométricos de especies para hidrógeno/aire = 1.5/0.5. La Fig. 2 muestra los resultados de independencia de la malla, que no muestran variaciones con 45570 elementos. Por lo tanto, los cálculos se establecen con este número de elementos para aprovechar el rendimiento computacional. El gráfico interior de la Fig. 2 muestra las curvas de polarización y densidad de potencia cuando se emplea el modelo Tomadakis-Sotirchos y concuerda bien con los datos experimentales a pesar de la brecha en los valores máximos de densidad de corriente donde la región de pérdidas de concentración.

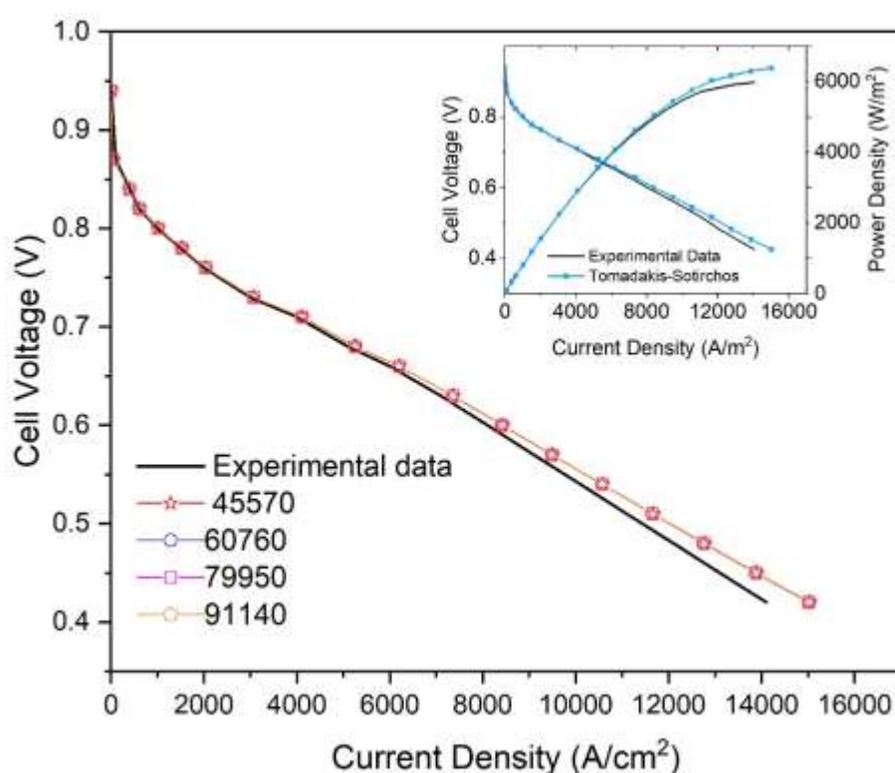
La Figura 3 muestra los mapas de contorno de la fracción molar de oxígeno, la saturación, la temperatura y la presión de saturación en la interfaz de la membrana-CL, donde las entradas están situadas en la parte inferior y las salidas en la parte superior, estableciendo la trayectoria del flujo a través del eje z. Estos contornos se obtuvieron a 0,85, 0,65 y 0,45 V para ilustrar el comportamiento de las variables a diferentes cinéticas electroquímicas.

La fracción molar de oxígeno y vapor de agua muestra el comportamiento esperado. En otras palabras, la fracción molar de oxígeno disminuye debido a la semirreacción electroquímica en la que el oxígeno se reduce para formar agua. Y la fracción molar de vapor de agua aumenta. Por tanto, la saturación de agua líquida aumenta hasta alcanzar un perfil similar al de la fracción molar de vapor de agua.

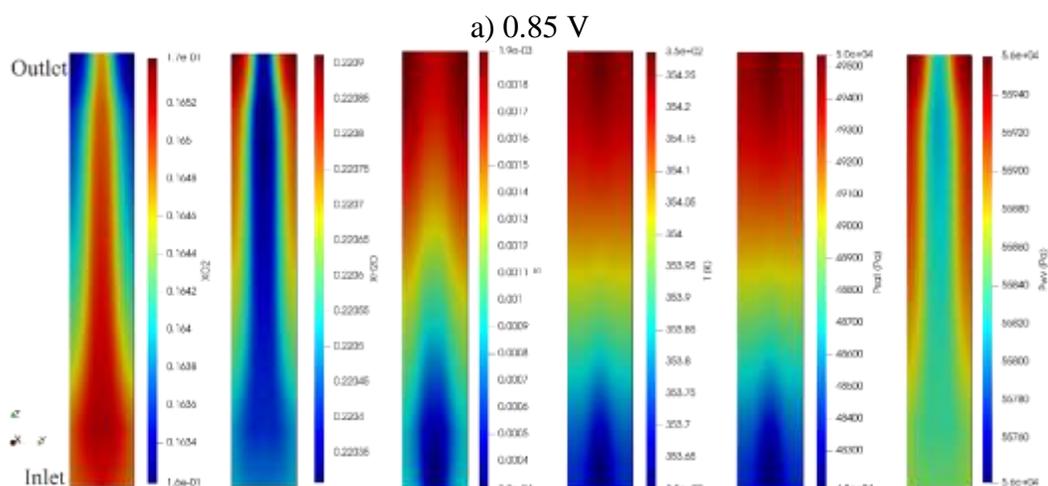
En este estudio no isotérmico, la distribución no uniforme de la temperatura local se ve afectada por el calor generado por el calentamiento óhmico, las reacciones electroquímicas y el cambio de fase del agua. Así, la temperatura local aumenta de 353 a 354,43 K a 0,85 V, 357,27 K a 0,65 V, y 361,59 K a 0,45 V. De este modo, la presión de saturación aumenta según la distribución de la temperatura local.

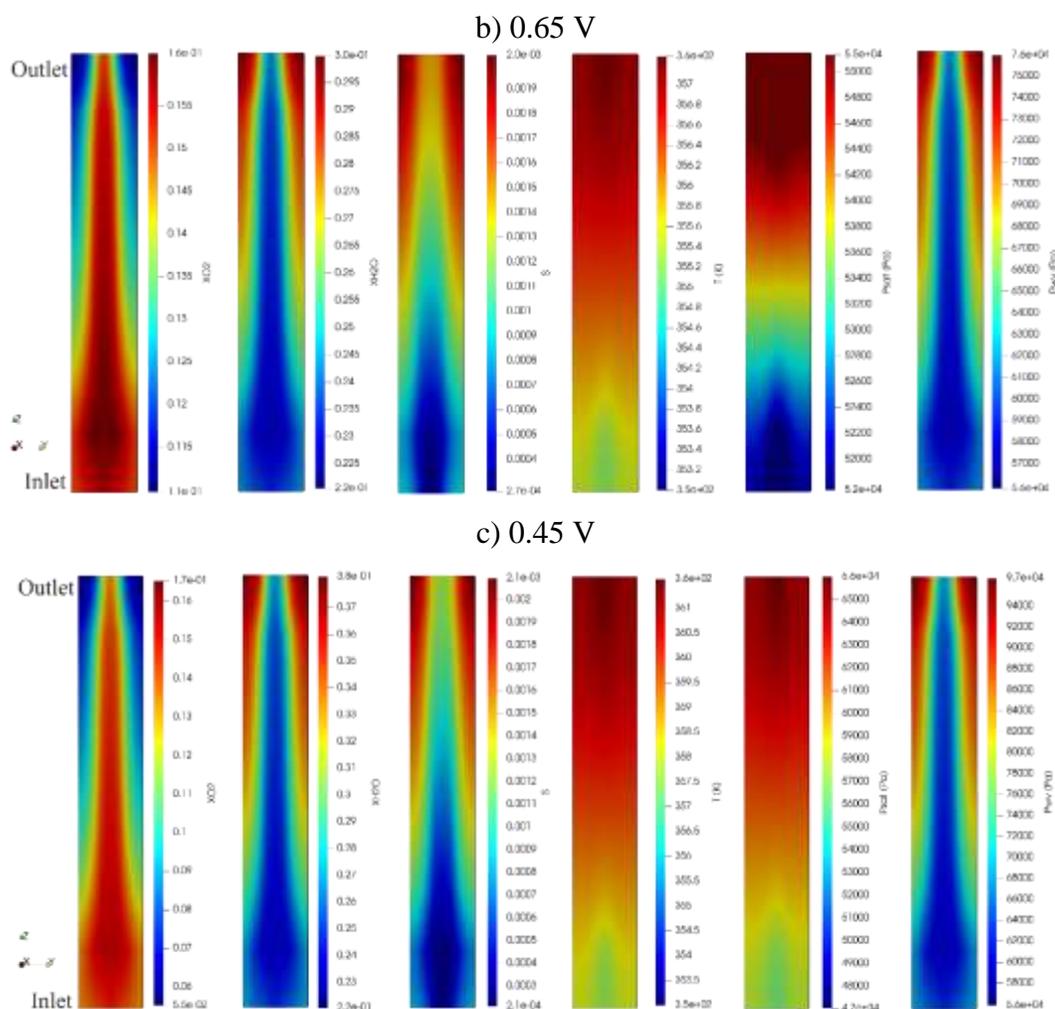
Por otro lado, la presión de vapor de agua se calcula a través de la fracción molar de oxígeno influida por el campo de presión de la mezcla de gases. Como resultado, la presión de saturación y la de vapor de agua aumentan debido a un incremento de la temperatura local y de la fracción molar del vapor de agua, respectivamente. Los mapas de contorno, representados en la Fig. 3, muestran cómo la sección media del flujo de la trayectoria ofrece una restricción mínima al suministro de la mezcla de gases. En cambio, en la superficie de la zona intercostal, la restricción aumenta debido a la compresión de las costillas de los paltos bipolares. Los perfiles de contorno de las fracciones molares de oxígeno y vapor de agua, la saturación y la presión de vapor de agua se definen a valores de tensión elevados debido al aumento de la cinética de reacción electroquímica.

**Figura 2** Validación de datos experimentales e independencia de resultados de la malla



**Figura 3** Contornos de la fracción molar de oxígeno, saturación, temperatura, presión de saturación y presión de vapor de agua en la interfaz membrana-CL a voltages de a) 0.85 V, b) 0.65 V, and c) 0.45 V





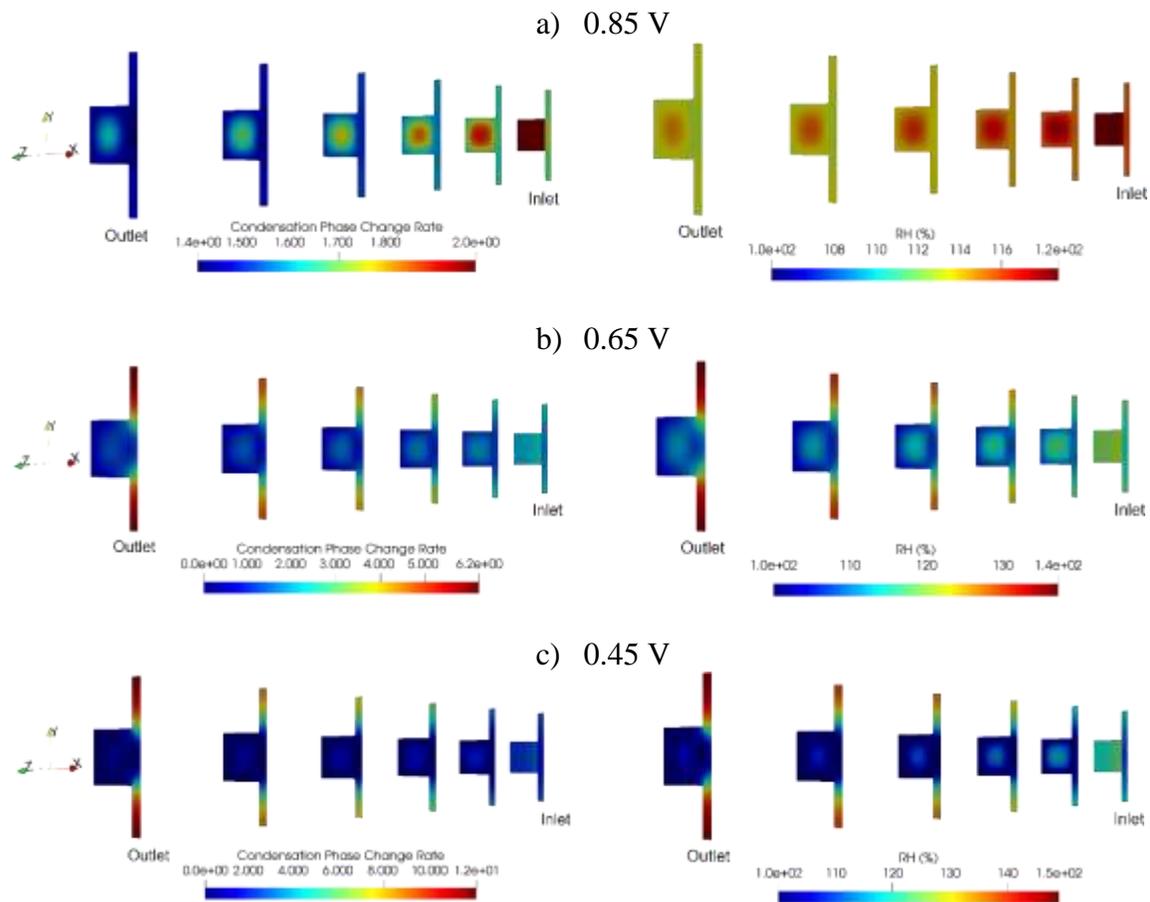
La Figura 4 muestra los perfiles de la tasa de condensación y de la humedad relativa a 0,85, 0,65 y 0,45 V. Se han colocado cortes a través del eje z que muestran la trayectoria del flujo compuesta por el canal de flujo de gas, el GDL y el CL para ilustrar las zonas de condensación de agua.

Se observa un perfil no uniforme de la tasa de condensación con valores positivos como resultado de la diferencia entre la presión de vapor de agua y la presión de saturación, lo que indica la formación de agua. Además, el perfil no uniforme de la saturación, la temperatura y la fracción molar de vapor de agua influyen en la tasa de condensación.

Además, la tasa de condensación aumenta cuando se incrementa el voltaje debido al aumento de la cinética de la reacción electroquímica, lo que indica una aceleración en el proceso de formación de agua. el mismo modo, la humedad relativa a través de la trayectoria del flujo presenta un aumento cuando se incrementa el voltaje. Aquí, los niveles de humedad aumentan debido al consumo de oxígeno, a los cambios en la distribución de la temperatura local y al contacto con la zona intercostal de los platos bipolares. Por lo tanto, la humedad relativa aumenta del 100 al 120 % a 0,85 V, al 140 % a 0,65 V y al 150 % a 0,45 V.

Se observa cómo la tasa de condensación aumenta a medida que aumenta la humedad relativa. Es decir, cuando la humedad relativa supera el 100 %, se produce la condensación. Además, la humedad relativa es del 120 % en la entrada a 0,85 V debido a la entrada de la mezcla de gas totalmente humedecida. Ésta entra en contacto con los electrodos porosos y la superficie de la costilla de tierra; además, el aumento de la temperatura local es de 1,43 K, y la cinética electroquímica es lenta a 0,85 V. Por ello, la humedad relativa disminuye a la salida en comparación con 0,65 y 0,45 V con un aumento de 4,27 y 8,59 K, respectivamente. La cinética es mayor al acercarse a la tensión máxima.

**Figura 4** Tasa de condensación a 0.85, 0.65, and 0.45 V con una humedad relativa de entrada de 100%



#### 4. Conclusiones

La distribución de la saturación de agua líquida se analizó con un modelo multifásico no isotérmico en 3D de una PEMFC simple. Este estudio muestra que la inundación de agua se localiza en los lados de la pared CL, mientras que la vía central ofrece una restricción mínima. Además, una distribución no uniforme de la temperatura afecta a la presión de saturación y, por tanto, a la humedad relativa. En consecuencia, la tasa de condensación aumenta cuando la humedad relativa se incrementa, dando lugar a la formación de agua. Puede observarse que los valores máximos de saturación, tasa de condensación y humedad relativa coinciden en la zona de las costillas de la tierra.

#### 5. Agradecimientos

Agradecemos a la SMH por la beca otorgada en el XXII Congreso Internacional de la Sociedad Mexicana del Hidrógeno. Gracias a la beca CONACYT-Sustentabilidad Energética [No. 254667] y a la Beca de Doctorado [No. 789267].

#### 6. Referencias

- Chugh, S., Chaudhari, C., Sonkar, K., Sharma, A., Kapur, G. S., & Ramakumar, S. S. V. (2020). Experimental and modelling studies of low temperature PEMFC performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, *xxxx*, 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.01.019>
- Esbo, M. R., Ranjbar, A. A., & Rahgoshay, S. M. (2020). Analysis of water management in PEM fuel cell stack at dead-end mode using direct visualization. *Renewable Energy*, *162*, 212–221. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.06.078>
- Esmaili, Q., Nimvari, M. E., Jouybari, N. F., & Chen, Y. S. (2020). Model based water management diagnosis in polymer electrolyte membrane fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, *45*(31), 15618–15629. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.04.031>

- Jiao, D., Jiao, K., & Du, Q. (2021). Numerical investigations of vapor condensation and water transport in gas diffusion layers of PEMFC. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, *177*, 121543. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121543>
- Lee, S. H., Nam, J. H., Kim, C. J., & Kim, H. M. (2021). Effect of fiber orientation on Liquid–Gas flow in the gas diffusion layer of a polymer electrolyte membrane fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, *46*(68), 33957–33968. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.07.205>
- Quan, P., & Lai, M. C. (2007). Numerical study of water management in the air flow channel of a PEM fuel cell cathode. *Journal of Power Sources*, *164*(1), 222–237. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.09.110>
- Tomadakis, M. M., & Sotirchos, S. V. (1993). Ordinary, transition, and Knudsen regime diffusion in random capillary structures. *Chemical Engineering Science*, *48*(19), 3323–3333. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(93\)80149-K](https://doi.org/10.1016/0009-2509(93)80149-K)
- Two-phase flow modeling for the cathode side of a polymer electrolyte fuel cell. (2012). *Journal of Power Sources*, *197*, 136–144. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.08.095>
- Wang, Y., Basu, S., & Wang, C. Y. (2008). Modeling two-phase flow in PEM fuel cell channels. *Journal of Power Sources*, *179*(2), 603–617. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2008.01.047>
- Wang, Y., & Wang, C.-Y. (2006). A Nonisothermal, Two-Phase Model for Polymer Electrolyte Fuel Cells. *Journal of The Electrochemical Society*, *153*(6), A1193. <https://doi.org/10.1149/1.2193403>

## Capítulo 2 Producción de hidrógeno por activación mecánica de la aleación intermetálica $\text{Al}_{13}\text{Fe}_4$

### Chapter 2 Hydrogen production by mechanical activation of the intermetallic alloy $\text{Al}_{13}\text{Fe}_4$

VAZQUEZ-ESCUADERO, Agustín, PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal\*, FLORES-CHAN, José Enrique y FIGUEROA-RAMIREZ, Sandra Jazmín

*Universidad Autónoma del Carmen, Campus III, Facultad de Ingeniería, Av. Central S/N, C.P. 24115, Ciudad del carmen, Campeche, Mexico.*

ID 1<sup>er</sup> Autor: *Agustín, Vázquez-Escudero* / **ORC ID:** 0000-0003-1839-2025, **CVU CONACYT ID:** 1017701

ID 1<sup>er</sup> Coautor: *Cristóbal, Patiño-Carachure* / **ORC ID:** 0000-0002-1436-1259, **CVU CONACYT ID:** 226327

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *José Enrique, Flores-Chan* / **ORC ID:** 0000-0003-4714-686X, **CVU CONACYT ID:** 175430

ID 3<sup>er</sup> Coautor: *Sandra Jazmín, Figueroa Ramírez* / **ORC ID:** 0000-0003-1368-1741, **CVU CONACYT ID:** 164797

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.10.17

A. Vázquez, C. Patiño, J. Flores y S. Figueroa

\*cpatino@pampano.unacar.mx.

O. Benavides & A. Flores (VV. AA.). Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente. Handbooks- TII- ©ECORFAN-Mexico, 2022.

## Resumen

Se produjo hidrógeno ( $H_2$ ) a partir de la activación mecánica de la aleación Al-20% peso Fe, es decir, intermetálica  $Al_{13}Fe_4$  sometida en un medio de agua destilada durante 24 horas. Para la activación mecánica fue utilizado un taladro de banco a una velocidad angular de 990 rpm, donde se emplearon brocas de 1/8, 3/8 y 1/2 pulgadas de diámetros. La medición de la producción de  $H_2$  se realizó utilizando un flujómetro de gases con capacidad de 1 a 200 ml/min. El máximo flujo volumétrico de  $H_2$  máximo logrado fue de 5 ml/min 8 horas después de iniciada la exposición al medio acuoso. Las técnicas de caracterización por DRX y microscopia óptica indican la deformación plástica que sufre la microestructura del material expuesto al taladrado del material. Siendo la broca de menor tamaño que promueve la mayor activación del material. Atribuyendo este resultado a la distorsión de la red microestructural, deformación de granos, exposición de una superficie desnuda de la aleación intermetálica que promueve la reacción de fragilización por hidrógeno como sigue  $2Al+3H_2O=Al(OH)_3+3H_2$ , donde el aluminio de la aleación intermetálica reacciona con el oxígeno del agua para producir hidrógeno y el hidróxido de Al.

### Activación mecánica, Intermetálico $Al_{13}Fe_4$ , Taladro, Microscopia óptica, DRX

#### Abstract

Hydrogen ( $H_2$ ) was produced from the mechanical activation of the  $Al_{13}Fe_4$  intermetallic alloy subjected to a medium of distilled water for 24 hours. For mechanical activation, a bench drill was used at an angular speed of 990 rpm, where bits of 1/8, 3/8- and 1/2-inch diameters were used. Measurement of  $H_2$  production was performed using a gas flow meter with a capacity of 1 to 200 ml/min. The maximum volumetric flow of  $H_2$  achieved was 5 ml/min 8 hours after the start of exposure to the aqueous medium. The XRD and optical microscopy characterization techniques indicate the plastic deformation suffered by the microstructure of the material exposed to the drilling of the material. Being the smallest size drill that promotes the greatest activation of the material. Attributing this result to microstructural lattice distortion, grain deformation, exposure of a bare surface of the intermetallic alloy that promotes hydrogen embrittlement reaction as follows  $2Al+3H_2O=Al(OH)_3+3H_2$ , where aluminum of The intermetallic alloy reacts with oxygen in water to produce hydrogen and Al hydroxide.

### Mechanical activation, Intermetallic $Al_{13}Fe_4$ , Drill, Optical microscopy, XRD

#### 1. Introducción

Las aleaciones de Aluminio se usan en múltiples actividades de la vida cotidiana, a nivel industrial y científico-tecnológico. En la actualidad existe gran interés en profundizar el conocimiento en la aplicación de las aleaciones de Al, en la generación de hidrógeno susceptible a ser usado como combustible, su combustión está libre de contaminantes atmosféricos y está disponible en grandes cantidades en el universo y en la tierra. A pesar de que el hidrógeno ( $H_2$ ), es un elemento que no se encuentra de manera libre en cantidades abundantes, existen muchos trabajos de investigación que lo han propuesto como fuente de energía (Crespo, 2022, Parmuzina, 2008, Lluís, 200, Kravchenko, 2005).

Las aleaciones de Al se proponen para fines energéticos debido a su alta eficiencia y rendimiento en la generación de  $H_2$ , con una generación teórica de 1360 ml/g de  $H_2$  a presión atmosférica estándar y la deformación/activación de la microestructura por sistema de hidrolisis genera  $H_2$  en 30 ml/s-g y un volumen total de 1300 ml/g, donde los resultados se atribuyen a la formación de micro celdas galvánicas y la remoción de la película de hidróxido de la superficie por solución alcalina (Ho, 2017, Lluís, 2009), una de las razones del incremento de la investigación de estos materiales prometedores en la generación de hidrógeno es la escasas, altos precios de los combustibles fósiles y el alto impacto que tienen con el medio ambiente, siendo el  $CO_2$ , el principal contaminante de estos combustibles fósiles, por lo tanto, es de mucho interés para la ciencia encontrar fuentes de combustibles alternos y amigables con el medio ambiente. Debido a la gran cantidad de agua en su estado líquido en los océanos, mares, mantos freáticos y ríos que nos rodean, resulta atractivo y viable estudiarla principalmente para descomponer la molécula del agua y utilizar el hidrógeno para producir energía eléctrica, de acuerdo con la ecuación 1.



Donde el aluminio reacciona con el oxígeno del agua para liberar hidrogeno y formar un hidróxido de aluminio. El uso del hidrógeno como combustible energético eficiente ha generado ciertas complicaciones como: métodos eficaces para su producción y seguridad de almacenamiento. Existen muchos métodos de poder generar o separar la molécula de hidrógeno de cualquier fuente fósil o renovable. Hoy en día, aun se produce hidrógeno usando métodos desarrollados desde décadas pasadas, conocidos como métodos convencionales: a partir de biomasa, pirolisis y electrolisis del agua, de la misma manera es posible obtenerlo por el proceso de desulfuración y las reacciones de desplazamiento agua-gas (Efstathio, 2013). Los cuales para poder producirlo o almacenarlo se requieren sistemas sofisticados de alta presión y energía, además, se incrementa la peligrosidad.

Así mismo en el aspecto económico, los costos del uso de esta tecnología son muy elevados. Nuevos métodos que van desde los más sencillos hasta los más complejos; por ejemplo, se han utilizado sustancias alcalinas/ácidos y aluminio, con el propósito de remover la capa de alúmina ( $Al_3O_2$ ) que posee en su superficie de manera natural, y fomentar la reacción del Al para producir  $H_2$ . Recientemente se ha utilizado la molienda mecánica de aleaciones inter metálicas de Al, (Xu, 2019), y aditivos, (Jinrui, 2021), para producir hidrógeno. Siendo esto aún un método poco explorado.

El aluminio y o materia prima se puede obtener de fuentes reciclables como son: envases de bebidas y comida, contenedores, perfiles estructurales etc. Con estos materiales reciclados el gasto de energía de fabricación y al igual que los costos por compra de la materia prima disminuirían considerablemente. Por lo tanto, en esta propuesta se emplea la activación mecánica de una aleación intermetálica de Al con 20% peso de Fe, para promover la producción de hidrógeno sin aditivos, usando como mecanismo activador “un taladro de banco variando la velocidad angular y los tamaños de brocas”.

## 2. Metodología

### 2.1 Preparación de las muestras

A partir de un lingote obtenido por colada convencional de la aleación intermetálica de  $Al_{13}Fe_4$ , fueron obtenidas las probetas seccionadas en piezas pequeñas, las cuales se le aplico un proceso de activación mecánica con un taladro de columna marca Knova. Fue aplicada una fuerza determinada por una balanza de piso, sobre la cual se somete a la muestra a un esfuerzo de acuerdo con la tabla 1, para obtener el material activado en forma de partículas deformadas, donde utilizaron tres brocas de tamaños 1/8, 3/8 y 1/2 pulgadas de diámetro a una velocidad angular constante de 990 rpm. Posteriormente las partículas se pulverizaron obteniéndose una distribución de tamaños homogénea de alrededor 0.5 mm.

**Tabla 1** Esfuerzos inducidos por el taladro sobre la aleación Al-20% peso Fe para producir la viruta activada

Diámetro de la broca		Área	Carga	Fuerza	Esfuerzo
Pulg	m	m <sup>2</sup>	Kg	N	MPa
1/8	0.003	0.00001	10	98.1	12.39
3/8	0.010	0.00007	20	196.2	2.75
1/2	0.013	0.00013	25	245.25	1.94

### 2.2 Medición de la producción de hidrógeno

Para la medición de la producción de hidrógeno, fue utilizado un flujómetro de gases marca Omega con capacidad de 1-200 ml/min. Fueron sometidos los polvos activados (4 g) de la aleación intermetálica en un medio de agua destilada (pH=7, 100 ml) para evaluar la producción de hidrogeno. Los datos del caudal volumétrico fueron almacenados en una computadora por un periodo de 24 h.

### 2.3 Caracterización de los materiales

La materia prima y las muestras fueron caracterizadas por microscopia óptica (MO) y difracción de rayos X. El equipo utilizado para MO fue un microscopio digital de USB 1000 con capacidad de 1000X. Se utilizo un difractómetro APD 2000,  $K\alpha$  Cu, barrido de 15-70 grados, 1 seg. por paso 0.02°.

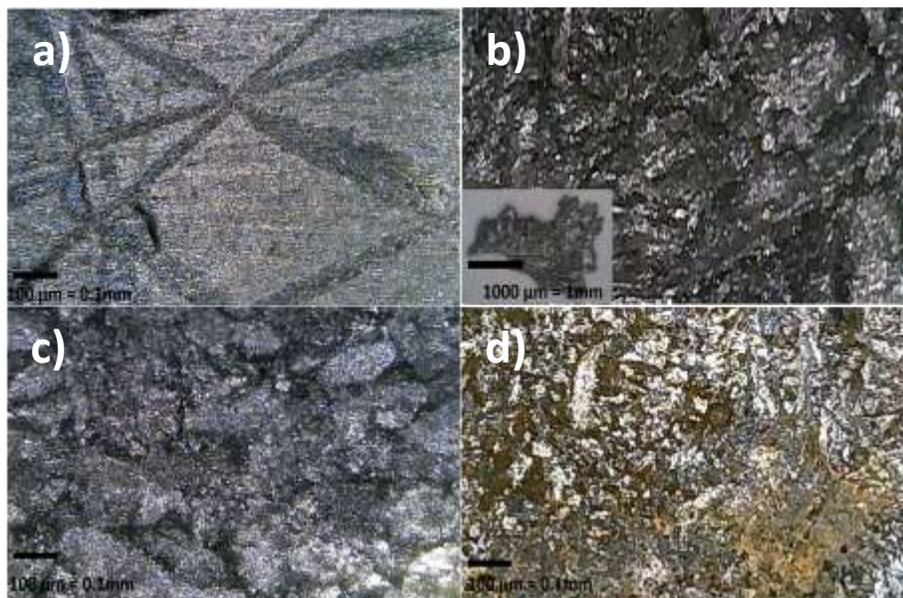
### 3. Resultados

#### 3.1 Microscopia óptica y dureza

En la figura 3.1a se presenta una micrografía de la aleación realizada por colada convencional, donde se puede apreciar la fase conocida como intermetálica  $Al_{13}Fe_4$  tomando una forma típicamente dendrítica de acuerdo con el diagrama Al-Fe. De la muestra activada mecánicamente por la broca de 1/8 de pulgada se muestra en las figuras 3.1b-c, en estas se aprecian los granos distorsionados y fracturados por los esfuerzos de carga axial y torsión del taladro. Se puede notar la reacción de oxidación del aluminio sobre la superficie de la muestra expuesta a producción de hidrógeno mostrada en la figura 3.1d. La tonalidad amarillenta mostrada alrededor de las partículas es típico de la oxidación llevada a cabo durante la producción de hidrogeno.

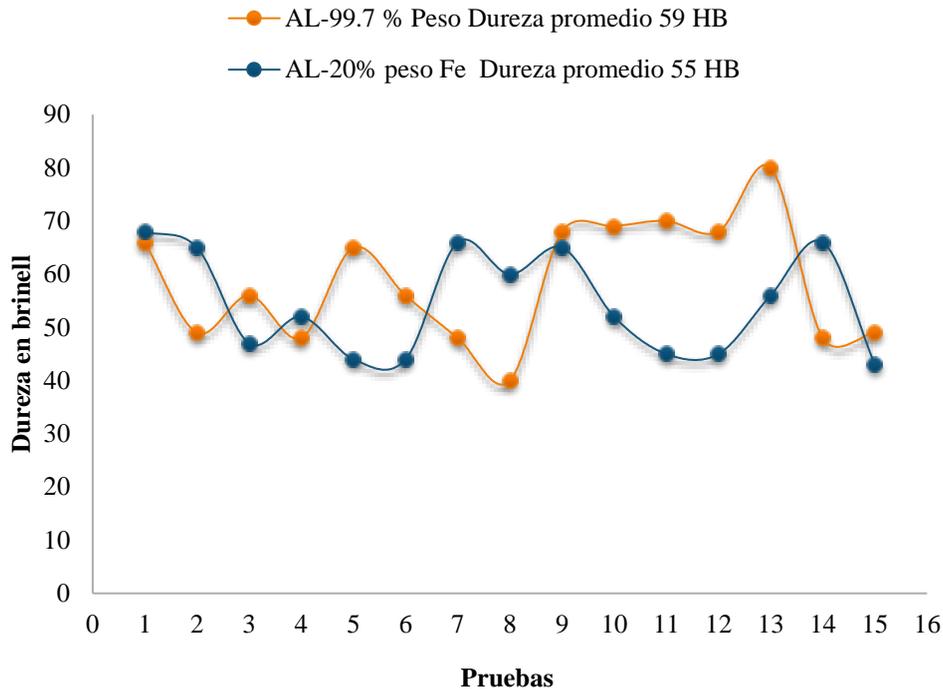
Es importante notar que los granos con fisuras y deformaciones fueron fracturados durante la reacción de oxidación por lo cual se torna una distribución de tamaños de partículas menores a los granos previos a la oxidación. Es lógico pensar, que este proceso mecánico promovió una fragilización con esfuerzos internos en la microestructura, haciéndola susceptible para la reacción del Al y el oxígeno del agua. De estos resultados, se puede deducir que las variaciones en las condiciones de carga y velocidad angular del taladro, se le atribuye este resultado a la distorsión de la red microestructural, deformación de granos y la exposición de una superficie desnuda de la aleación intermetálica  $Al_{13}Fe_4$ . Así, las muestras activadas mecánicamente que utilizan el taladro de banco favorecen las reacciones de producción de hidrógeno, donde la activación mecánica, es la que aporta la energía de activación, siendo diferente a la activación mecanoquímica del aluminio, donde conduce a su activación para la reacción de agua/aluminio activado, aditivos ácidos/alcalinos (Ilyukhina, 2017)

**Figura 3.1** a) Aleación intermetálica  $Al_{13}Fe_4$ , b) partículas de  $Al_{13}Fe_4$  activada mecánicamente, c) Muestras pulverizadas de aleación intermetálica sin exponer a medio acuoso y d) muestra después de ser expuesta a un medio acuoso por 24 horas



*Fuente: Elaboración Propia*

Se conoce que las propiedades mecánicas de fragilización están inversamente asociadas con la dureza del material, por lo tanto, se expone una comparación de dureza HB (Brinell) de la aleación  $Al_{13}Fe_4$  con el aluminio 6063. Este resultado se desprende en la gráfica de dureza de la figura 3.2, en la cual se puede observar el comportamiento en 15 pruebas realizadas en diferentes regiones de ambos lingotes. Se observa que el comportamiento de la dureza Brinell se mantiene en promedio constante para ambas aleaciones, lo que indica que la presencia de la fase intermetálica en la aleación  $Al_{13}Fe_4$  no le provee algún cambio significativo de dureza.

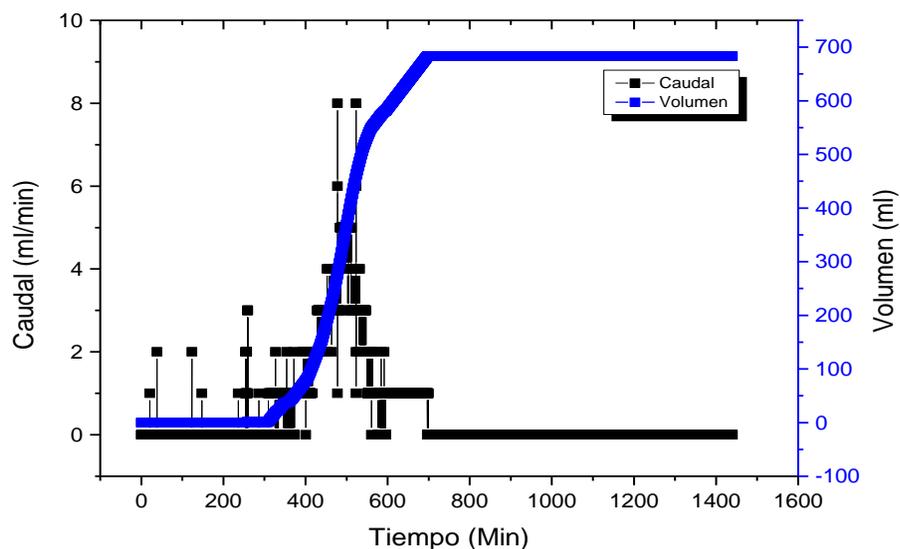
**Figura 3.2** Comportamiento de dureza de Al-99.7% y Al-20% Fe

Fuente: Elaboración Propia

### 3.2 Producción de hidrógeno

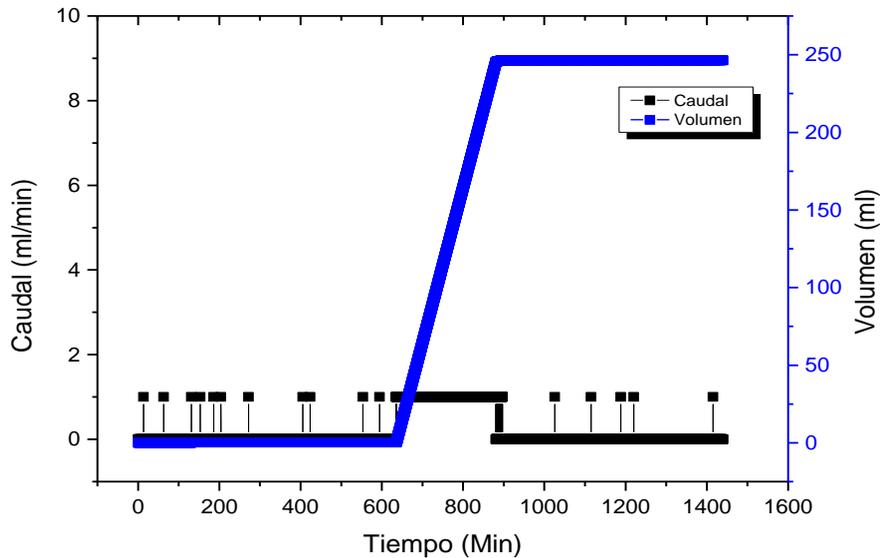
En la Figura 3.3 se muestra la curva de generación de  $H_2$  en la aleación intermetálica  $Al_{13}Fe_4$  y broca de 1/8 a 990 RPM. Se puede observar un comportamiento de flujo volumétrico constante de 1 ml/min inmediatamente después de iniciar la prueba, el flujómetro detecta el  $H_2$ , que inicialmente se muestra en 1 ml/min con variaciones de 3 ml/min y que logra alcanzar un caudal de 8 ml/min al minuto 500, para después descender con un comportamiento tipo gaussiano, se mantiene constante en 0 hasta el minuto 1300. De la misma manera se puede observar el volumen de  $H_2$  acumulado en función del tiempo mostrado en la gráfica color azul (eje vertical derecho), donde se obtiene un volumen de 650 ml aproximadamente durante todo el proceso o tiempo de exposición de la muestra. Esto explica la reacción de la probeta debido a la estructura porosa al entrar en contacto con la solución acuosa donde reacciona por la energía acumulada debido al proceso de mecano-síntesis. Esto indica que los productos de corrosión formados durante el proceso de generación de  $H_2$  se van acumulando sobre la superficie de la probeta, lo que disminuye la reacción del agua destilada y la superficie desnuda de la aleación intermetálica por lo que trae como consecuencia la disminución de la generación de  $H_2$ .

**Figura 3.3** Evolución de flujo volumétrico de hidrogeno con broca 1/8 y volumen total producido con las mismas medidas de broca en 100 ml de agua con pH=7 en un periodo de 24 horas



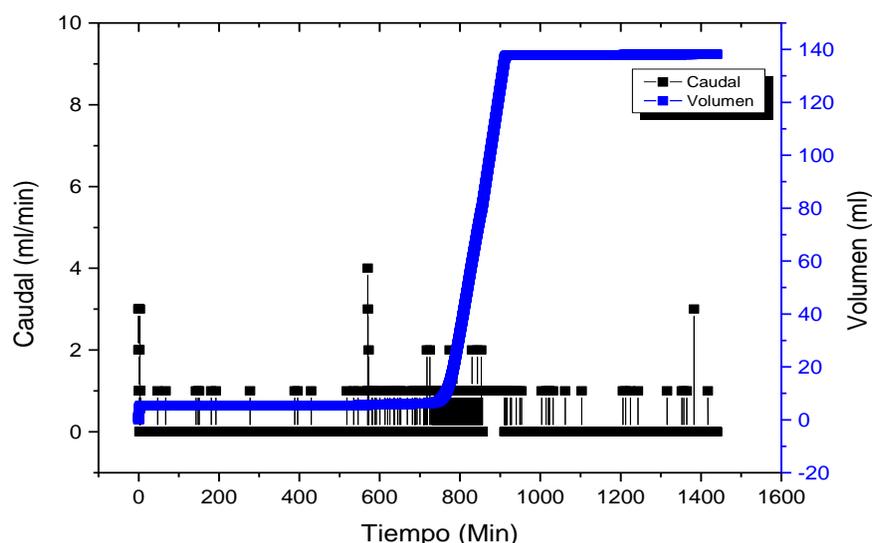
Para la gráfica 3.4 con la broca 3/8 se obtiene un flujo constante de 1 ml/min de H<sub>2</sub> en 24 horas, donde el tiempo de producción constante de H<sub>2</sub> fue entre el minuto 600 y 900. De la misma manera el volumen obtenido fue de 250 ml aproximadamente con la muestra únicamente activada mecánicamente sumergida en agua destilada a pH 7. De acuerdo con la tabla 1, donde el esfuerzo al que fue sometida la probeta para obtener las virutas de la aleación fue de 2.5 Mpa también se observa la relación con la producción de H<sub>2</sub>, que al disminuir el esfuerzo en la probeta también disminuye la energía de activación.

**Figura 3.4** Evolución de flujo volumétrico de hidrogeno con broca 3/8 y volumen total producido con las mismas medidas de broca en 100 ml de agua con pH=7 en un periodo de 24 horas



Para el caso de la muestra analizada con la broca de 1/2 de pulgada de la aleación de Al<sub>13</sub>Fe<sub>4</sub> se midieron caudales de entre 1 y 4 ml/min aproximadamente en un periodo de 24 horas como se muestra en la gráfica 3.5. En la muestra que se analizó se observa un comportamiento de caudal constante de 1 ml/min, el caudal se observa inmediatamente después de iniciar la prueba minuto 1, cuando el flujómetro comienza a detectar el gas H<sub>2</sub> que inicialmente se muestra en 3 ml/min con algunos picos a 2 y 4 ml/min, pero en su mayoría los caudales observados son de 1 ml/min hasta el que se mantiene constante hasta el minuto 1400 aproximadamente, donde a partir de este tiempo el caudal desciende a 0. Para la gráfica de volumen total con la broca de 1/2 de la muestra analizada con 4 gramos de aleación se obtienen alrededor de 100 ml de hidrogeno en 24 horas, además de acuerdo con la tabla 1, el esfuerzo en la probeta para generar la viruta activada mecánicamente es de 1.94 Mpa, con lo que se corrobora nuevamente que, si el esfuerzo para generar la viruta disminuye, también lo hace la energía de activación en el material.

**Figura 3.5** Evolución de flujo volumétrico de hidrogeno con broca 1/2 y volumen total producido con las mismas medidas de broca en 100 ml de agua con pH=7 en un periodo de 24 horas



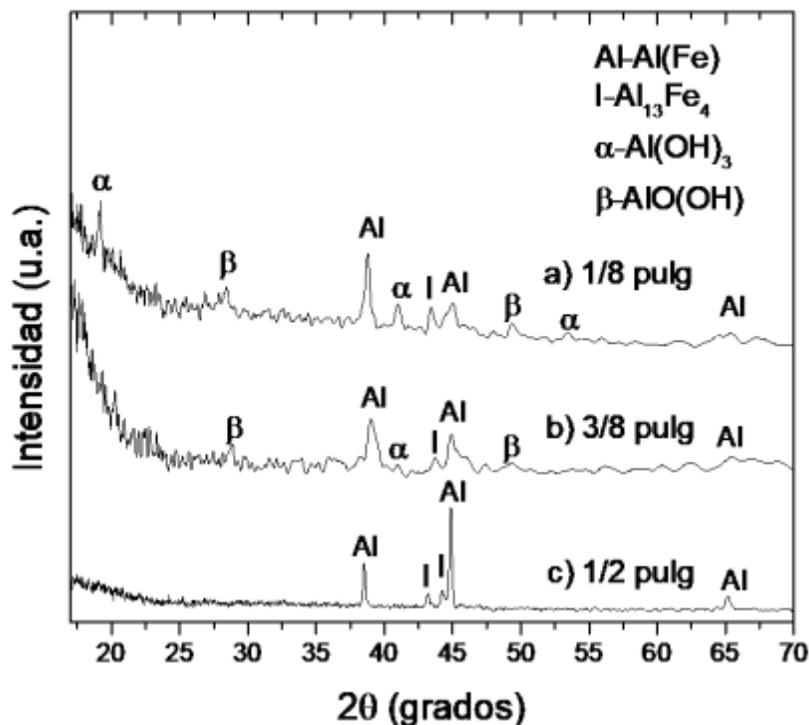
En condiciones normales la superficie del Al puro se forma una capa de óxido nativo ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), que impide la reacción directa del Al puro con el medio ambiente, disminuyendo las reacciones de corrosión, no obstante, la ausencia de la formación de dicha capa de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  en la superficie de la aleación  $\text{Al}_{13}\text{Fe}_4$  indica que el proceso de mecano-síntesis activa la superficie promoviendo las reacciones electroquímicas en la interfaz metal electrolito.

### 3.3 Caracterización por DRX

Cuando se examinan los residuos de los 4 g de las muestras que fueron expuestas durante 24 horas en un medio acuoso de 100 ml, se puede comprobar la producción de  $\text{H}_2$  mediante la obtención de los subproductos encontrados en los patrones de DRX. Con el patrón se confirma la presencia de cuatro fases: una fase intermetálica I- $\text{Al}_{13}\text{Fe}_4$ , una solución sólida Al- Al(Fe) y dos hidróxidos de aluminio bayerita  $\alpha$ -  $\text{Al}(\text{OH})_3$  y bohemita  $\beta$ - $\text{AlO}(\text{OH})$ . Para la aleación intermetálica cuya activación se realizó con 3 diferentes diámetros de brocas se pueden ver como el aluminio (Al) disminuye su intensidad conforme se cambia de broca de 1/2, pasa por 3/8, hasta llegar a 1/8, donde claramente se ve su disminución, así mismo, con el intermetálico (I) llega al mismo punto, es decir, se puede ver en ( $\beta$ ) la presencia de bohemita y en ( $\alpha$ ) aparece la bayerita, producto de la liberación de  $\text{H}_2$ .

De aquí se puede corroborar que la ecuación 1 describe la reacción llevada a cabo promovida por la activación mecánica. Así mismo se comprueba la generación de hidrogeno, lo que indica que las partículas de aluminio reaccionaron al contacto con el agua para provocar la liberación de hidrogeno.

**Figura 3.6** Patrones de DRX de las muestras de  $\text{Al}_{13}\text{Fe}_4$  expuestas durante 24 horas en medio acuoso



## 4. Conclusiones

Fue llevada a cabo la producción de hidrogeno ( $\text{H}_2$ ) usando una aleación de  $\text{Al}_{13}\text{Fe}_4$  activada mecánicamente en una solución acuosa de 100 ml a  $\text{pH}=7$  y un taladro de banco que sometieron una probeta a esfuerzos de 1 a 12 Mpa (tabla 1) aproximadamente para obtener la activación. La broca de mejor rendimiento fue la de 1/8 de pulgada. De acuerdo con la tabla 1, los cálculos de esfuerzo aplicado al sistema, se determina que con la broca de 1/8 ofrece un mayor esfuerzo (12.39 Mpa) en la superficie del metal para perforarlo y deformarlo promoviendo así la activación mecánica. El volumen máximo de hidrogeno generado fue de 700 ml (figura 3.3) de acuerdo con la gráfica del volumen acumulado. Con estos resultados, se puede sugerir como un nuevo método de producción de hidrogeno en el área de energías limpias y alternas y que además se concluye que el esfuerzo al que se somete la probeta para generar las virutas activadas este ligado directamente a la producción de  $\text{H}_2$ , encontrando un esfuerzo Optimo de entre 8 y 12 Mpa.

## 5. Agradecimiento

El autor y coautores expresan su agradecimiento al Dr. Mohamed Abatal por las facilidades al acceso del equipo de DRX, al M.C. Iván E. Castro Cisneros por el apoyo en la caracterización de muestras de DRX. Así como también a la Fundación Pablo García por el financiamiento mediante la beca crédito de posgrado [con numero de contrato 89/21] brindado en la presente investigación.

## 6. Referencias

Crespo Álvarez, A. M. (2022). Implementación de sistemas basados en hidrógeno en la industria de la movilidad marítima. Caso de estudio para uno de los remolcadores del Puerto de Valencia. <http://hdl.handle.net/10251/189630>; <https://riunet.upv.es/handle/10251/189630>

Efstathio, C.M.K.a.A.M., Hydrogen Production Technologies: Current State and Future Developments. Conference Papers in Science, 2013. 2013: p. 2013. <https://doi.org/10.1155/2013/690627>; <https://downloads.hindawi.com/archive/2013/690627.pdf>

Ho, C.-Y., Hydrolytic reaction of waste aluminum foils for high efficiency of hydrogen generation. International Journal of Hydrogen Energy, 2017. 42: p. 19622-19628. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.06.104>; <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0360319917324187>

Ilyukhina, A. V. Bulychev, B.M. Studies on microstructure of activated aluminum and its hydrogen generation properties in aluminum/water reaction. Journal of Alloys and Compounds, 2017. 690: p. 321-329. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.08.151>; <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0925838816325300>

Jinrui Guo, Z.S., Jing Tian, Jinhua Deng, Tao Fu, Yong Liu, Enhanced hydrogen generation from Al-water reaction mediated by metal salts. International Journal of Hydrogen Energy, 2021. 46: p. 3453-3463. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.10.220>; <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0360319920341021>

Kravchenko, O. V. B. M. Bulychev, K. B. Kalmykov, Activation of aluminum metal and its reaction with water. Journal of Alloys and Compounds 2005. 397: p. 58-62. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.11.065>; <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0925838805000265>

Lluís Soler, A.M., Jorge Macanás, María Muñoz, Juan Casado, Hydrogen generation by aluminum corrosion in seawater promoted by suspensions of aluminum hydroxide. International Journal of Hydrogen Energy, 2009. 34: p. 8511-8518. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.08.008>; <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0360319909012543>

Lluís Soler, J.M., María Muñoz, Juan Casado, Aluminum and aluminum alloys as sources of hydrogen for fuel cell applications. Journal of Power Sources, 2007. 169: p. 144-149. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.01.080>; <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378775307002236>

Parmuzina, A. V. O.V.K. Activation of aluminum metal to evolve hydrogen from water. International Journal of Hydrogen Energy, 2008. 33: p. 3073-3076. [10.1016/j.ijhydene.2008.02.025](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.02.025); <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0360319908001407?via%3Dihub>

Xu Guan, Z.Z., Ping Lu, Fengs Wu, Shijie Dong, Effects of preparation method on the hydrolytic hydrogen production performance of Al-rich alloys. Journal of Alloys and Compounds, 2019. 796: p.210-220. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.05.053>; <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0925838819317177>

### Capítulo 3 La fotocatalisis una opción de tratamiento para la eliminación de fármacos y disruptores endócrinos

#### Chapter 3 Photocatalysis a treatment option for the elimination of drugs and endocrine disruptors

AGUILAR-UCAN, Claudia Alejandra †\*, MONTALVO-ROMERO, Carlos, ARIAS-MATEO, María y RAMIREZ- ELIAS, Miguel Angel

*Universidad Autónoma del Carmen, Campus I, Facultad de Química, Calle 56 No.4, Avenida Concordia, C.P 24180 Ciudad del Carmen, Campeche México*

ID 1<sup>er</sup> Autor: *Claudia Alejandra, Aguilar-Ucán* / **ORC ID:** 0000-0002-1733-2867 **CVU CONACYT ID:** 93717

ID 1<sup>er</sup> Coautor: *Carlos, Montalvo-Romero* / **ORC ID:** 0000-0002-6761-3261, **CVU CONACYT ID:** 339918

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *María Cruz, Arias-Mateo* / **ORC ID:** 0000-0002-2040-5393, **CVU CONACYT ID:** 849248

ID 3<sup>er</sup> Coautor: *Miguel Angel, Ramírez-Elías* / **ORC ID:** 0000-0002-3962-1117, **CVU CONACYT ID:** 226557

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.18.28

C. Aguilar, C. Montalvo, M. Arias y M. Ramírez

\* caguilar@pampano.unacar.mx

O. Benavides & A. Flores (VV. AA.). Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente. Handbooks- TII- ©ECORFAN-Mexico, 2022.

## Resumen

Los procesos de oxidación avanzada; en particular la fotocatalisis son tratamientos eficientes en la remoción de moléculas orgánicas como los fármacos y los disruptores endócrinos como el acetaminofén (ACET) y el nonilfenol (NPEG). Recientemente ciertas moléculas orgánicas fueron clasificados como contaminantes emergentes por los riesgos potenciales que representan para la salud humana y al medio ambiente; algunas de estas sustancias como los fármacos en especial los disruptores endocrinos, píldoras contraceptivas entre otras; pasan por procesos de tratamientos biológicos en plantas de tratamiento, sin embargo parte de sus características como la capacidad estrogénica o sus productos de descomposición secundaria persisten o suelen ser más tóxicos que la molécula original. En este trabajo se comparan las eficiencias del catalizador comercial Oxido de titanio Degussa P-25 (CAT1) y el óxido de titanio sintetizado con un precursor alcóxido (CAT2) para la remoción de ambas moléculas orgánicas (ACET y NPEG), por procesos de fotocatalisis. Para aumentar la eficiencia de los catalizadores y la capacidad de absorber energía en el rango de la luz visible ambos sólidos fueron dopados con partículas de plata con el método de foto-depositación, bajo las mismas condiciones. Los catalizadores CAT1 y CAT2 fueron caracterizados por difracción de rayos X (DRX), fisisorción de nitrógeno (BET); y por Reflectancia Difusa (RD). Se realizaron diferentes pruebas de degradación con concentraciones variables de ambas moléculas, los resultados se evaluaron mediante cromatografía de líquidos de alta resolución (HPLC) y por Espectroscopía de UV (UV-Vis); con los resultados se pudo establecer el perfil de degradación de ambas moléculas y comparar los porcentajes de conversión; estos resultados indican que ambos catalizadores son eficientes para degradar al ACET y al NPEG.

## Contaminantes emergentes, Oxidación avanzada, Catálisis, Degradación

### Abstract

Advanced oxidation processes; in particular, photocatalysis are efficient treatments in the removal of organic molecules such as drugs and endocrine disruptors such as acetaminophen (ACET) and nonylphenol (NPEG). Recently certain organic molecules were classified as emerging pollutants; due to the potential risks they represent for human health and the environment; some of these substances such as drugs, especially endocrine disruptors, birth control pills, among others; They go through biological treatment processes in treatment plants, however part of their characteristics such as estrus capacity or their secondary discovery products persist or are usually more toxic than the original molecule. In this work, the efficiencies of the commercial catalyst Degussa P-25 titanium oxide (CAT1) and the titanium oxide synthesized with an alkoxide precursor (CAT2) are compared for the removal of both organic molecules (ACET and NPEG), by photocatalysis processes. To increase the efficiency of the catalysts and the ability to absorb energy in the visible light range, both solids were doped with silver particles using the photodeposition method, under the same conditions. Catalysts CAT1 and CAT2 were characterized by X-ray diffraction (XRD), nitrogen physisorption (BET); and by Diffuse Reflectance (DR). Different degradation tests were obtained with variable concentrations of both molecules, the results were evaluated by high performance liquid chromatography (HPLC) and by UV Spectroscopy (UV-Vis); with the results it was possible to establish the degradation profile of both molecules and compare the conversion percentages; these results indicate that both catalysts are efficient to degrade ACET and NPEG.

## Emerging contaminants, Advanced oxidation, Catalysis, Degradation

### Introducción

El aumento en la población mundial, ha provocado un incremento en la demanda de agua apta para consumo humano; desafortunadamente, la existencia de recursos hídricos de buena calidad es cada vez más escasa, las fuentes naturales de agua se contaminan por las descargas de aguas residuales de las áreas urbanas e industriales. Entre las sustancias que han llamado la atención están los "Contaminantes emergentes" que incluye a los fármacos, disruptores endócrinos, productos de aseo personal entre otros y a sus residuos; para estas sustancias, su descarga no se encuentra regulada por la legislación mexicana vigente. En otros países, (Kolpin et al., 2002) se han reportado más de ochenta y dos compuestos orgánicos como: antibióticos, analgésicos, estimulantes, esteroides, hormonas entre otras sustancias en aguas naturales y residuales.

En trabajos recientes se han reportado la presencia de fármacos y disruptores endócrinos en aguas continentales de países europeos, asiáticos y de América del Norte (Wilkinson et al., 2022). Los residuos de antibióticos y sus productos de descomposición, también se han detectado en aguas residuales (Chan et al., 2022). En México se ha detectado la presencia de fármacos y otras moléculas orgánicas (López et al., 2022; Ronderos et al., 2022).

En México, uno de los fármacos con amplio consumo es el acetaminofén o paracetamol, que por su uso desmedido y su alta accesibilidad está clasificado como un contaminante emergente de interés (Chopra et al., 2020). La presencia del acetaminofén en los sistemas de tratamientos biológicos provoca la inhibición en el crecimiento de los microorganismos, que disminuye la eficiencia de los procesos, así mismo, sus productos de descomposición pueden formar productos más tóxicos al reaccionar con el cloro y otros agentes desinfectantes (Bender y Macheran 2006). Chopra et al., (2020) identificó cepas bacterianas de: *Bacillus sp.*, *Enterococcus sp.* y *Staphylococcus spp*; capaces de tolerar y degradar al acetaminofen y a sus productos secundarios, sin embargo, la inyección continua de diferentes fármacos pueden poner en riesgo la calidad del agua tratada al disminuir la eficiencia de los sistemas de tratamiento. En este mismo sentido, los disruptores endócrinos se pueden reducir mediante la aplicación de tratamientos biológicos; aunque estos métodos no reducen significativamente los efectos estrogénicos, pero si la concentración inicial, estas sustancias son detectables en las aguas residuales por los estrógenos esteroides que son eliminados del cuerpo de forma biológicamente activa (Nakashima et al., 2002).

La presencia de fármacos en aguas residuales se debe a que una parte de ellos es excretada por el organismo humano después de una parcial conversión en metabolitos solubles en agua, estos residuos se distribuyen dentro del medio ambiente y constituyen un amplio rango de sustancias potencialmente riesgosas para la salud humana; por lo que es necesario adaptar procesos de tratamiento adecuados que permitan reducir la concentración y los efectos secundarios.

Los procesos fotocatalíticos han sido empleados con gran éxito en la degradación de fármacos y disruptores endócrinos; este proceso utiliza oxidantes o reductores químicos que pueden acelerar las reacciones de oxidación-reducción y son eficientes para el tratamiento de compuestos orgánicos recalcitrantes; las reacciones fotocatalíticas ocurren cuando un fotón con energía igual o mayor, a la energía de banda prohibida del fotocatalizador ( $E_g$ ) incide sobre la superficie, resultando en una excitación molecular que genera el par electrónico hueco-electrón ( $h^+$ ,  $e^-$ ), las cuales pueden migrar hacia la superficie del catalizador y reaccionar con las especies adsorbidas (Blanco et al., 2004, Kabra et al., 2004).

El uso de catalizadores ocupa un importante lugar en estos procesos y ofrece ventajas al transformar químicamente la estructura de diversas moléculas orgánicas; (Jannatun et al., 2020, Abbas et al., 2022; Al-gharibi et al., 2021; Aminzadeh et al., 2021), cuando se modifica el catalizador mediante la adición de partículas metálicas como la plata, se puede aumentar su eficiencia al evitar la recombinación de carga por la remoción de electrones de la banda de valencia, y dejar disponibles para la reacción los huecos fotogenerados (Stathatos et al., 2001) adicionalmente, la depositación de plata en el óxido de titanio le confiere capacidad antibacteriana, eficiente para la inactivación de virus en el tratamiento del agua (Liga et al., 2011).

## Objetivos

Comparar la eficiencia de los catalizadores comerciales  $TiO_2$  (Degussa P-25) y  $TiO_2$ -Ag sintetizado por sol gel ambos dopados con partículas de plata en la remoción de un fármaco y un disruptor endócrino.

### Objetivos específicos

- Sintetizar al catalizador de titanio bajo el método sol gel
- Dopar mediante foto-depositación ambos catalizadores (comercial y sintetizado)
- Caracterizar el catalizador sintetizado por DRX, BET y RD
- Comparar la eficiencia de ambos catalizador

## Descripción del método

### Síntesis y dopaje del catalizador

Se sintetizó el catalizador de titanio por el método de sol gel utilizando el precursor butóxido de titanio (CAS 5593-70-4) y 1-Butanol (CAS 71-36-3), el proceso del sol gel tiene dos etapas generales: la dispersión de partículas sólidas de tamaño coloidal (1-100 nm) en una fase líquida (formación del sol) y la gelificación del sol, en este proceso se mezclaron 24.34 g de butóxido de titanio con  $\frac{3}{4}$  de butanol bajo agitación continua a 250 rpm. Tras una hora de reacción (y manteniendo la agitación) se adiciona, mediante goteo lento, la  $\frac{1}{4}$  parte del alcohol restante y los 7.8 g de agua. La mezcla se preparó en un equipo OS20 – Pro de la marca Science Med Finland Technology; el equipo de reacción opera a reflujo total. El gel obtenido permaneció en reposo durante 24 horas, posteriormente se secó a 120°C por 12 horas y finalmente se calcinó a 550°C por 5 horas. Para realizar la foto-depositación de la plata en ambos catalizadores se utilizaron sales precursoras de  $\text{AgNO}_3$  la cantidad a utilizar se determinó mediante la siguiente relación:

$$\text{AgNO}_3(\text{peso de la sal precursora en g}) = \frac{(\text{peso de la Ag})(\text{peso molecular del of AgNO}_3)}{(\text{peso molecular de Ag})} \quad (1)$$

En ambos catalizadores se realizó la foto-depositación de la plata en las mismas cantidades y bajo el mismo procedimiento, para favorecer los procesos de depositación, la solución permanece una hora en fase oscura, después de ese lapso permanece 5 horas con la irradiación de 4 lámparas de UV ( $\lambda_{\text{max}} = 365 \text{ nm}$ , Cole-Parmer E-09815-55); se retira el agua por filtración a vacío seguida de un proceso de secado a 120°C por 5 horas y calcinación a 550°C por 5 horas; proceso fundamental para definir las características físicas y químicas del material.

### Caracterización del catalizador

La caracterización de los materiales sintetizados permite establecer las propiedades estructurales de los mismos, proporciona información sobre la composición, el tamaño de partícula, el área superficial entre otras propiedades; que se utilizan para predecir la actividad foto-catalítica; así mismo se puede tener imágenes de la topografía de ahí la importancia que tiene el establecimiento de técnicas que permitan determinar de manera precisa y fiable las características fundamentales, en este trabajo el catalizador sintetizado se caracterizó por difracción de rayos X (DRX), Esta técnica se emplea para identificar y determinar las estructuras cristalinas presentes en el catalizador.

Los patrones de difracción son característicos de cada material, constituyen una huella digital para cada compuesto cristalino, por lo que esta técnica permitirá identificar las fases cristalinas presentes en el catalizador sintetizado, los análisis se realizaron utilizando un equipo Rigaku, modelo SMART LAB utilizando como fuente de rayos X un tubo de cobre, los rayos X permiten determinar los ángulos y longitudes en una estructura, la capacidad depende de la cantidad de electrones en un átomo, estos están alineados en planos y cada plano difracta rayos X.

El área superficial es una propiedad importante de los materiales, ya que controla la interacción entre materiales sólidos y líquidos y permite determinar la efectividad de la reacción entre el semiconductor y el contaminante a remover. Tomando como principio que la superficie limpia de un material sólido adsorbe moléculas de gas de sus alrededores, el sólido en polvo se pone en contacto con nitrógeno y en función de la cantidad de gas adsorbido a temperatura de ebullición del gas a presión normal se estima el área superficial del material, este proceso es revertido por una desorción.

La medición del área superficial se realizó con el equipo BelCorp II y la absorción en el rango del Visible se determinó mediante Reflectancia difusa (RD); esta última técnica analítica permite determinar si el sólido sintetizado es capaz de absorber en el rango de la luz visible y para obtener un valor estimado de la banda prohibida (Eg).

## Pruebas de fotoactividad

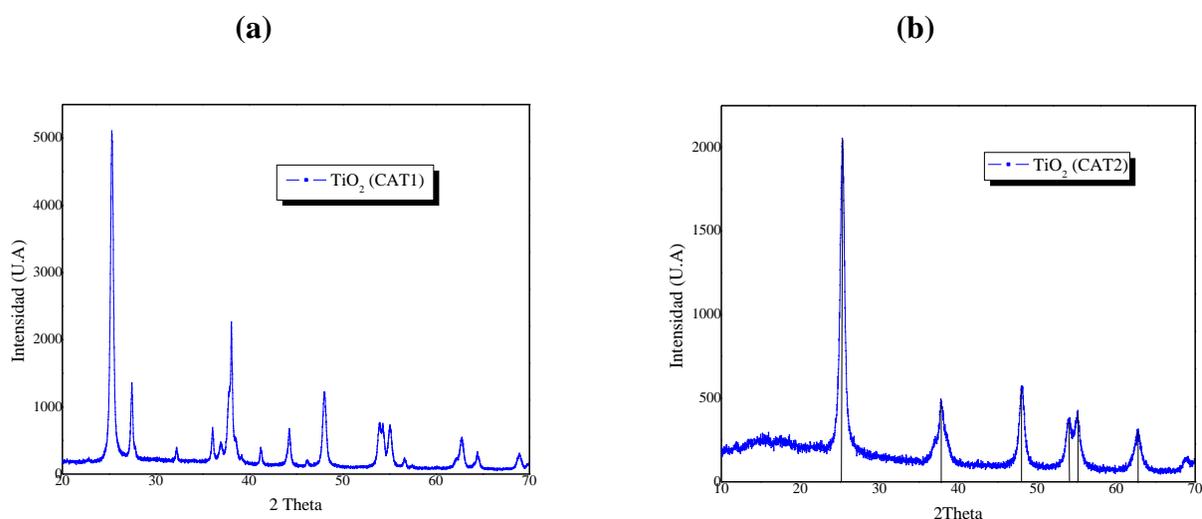
Para las pruebas de degradación fotocatalítica se utilizó al acetaminofen (N-Acetyl-4 aminophenol CAS 103-902) 4-Nonylphenyl-polyethylene glycol (CAS 9016-45-9). Para la evaluación de las muestras de reacción por HPLC; se utilizó un equipo de la marca Agilent 1100 adaptado con una bomba cuaternaria y una columna Zorbax (C-18); la fase móvil se preparó (utilizando la función gradiente del equipo), con una mezcla de agua grado HPLC de la marca Merck y metanol grado espectroscópico (CAS 67-56-1) de la marca Fischer Scientific. Previo a los análisis, las muestras de reacción se pasaron por un medio filtrante de acetato de celulosa de 0.22  $\mu\text{m}$  (Millipore corp. Bedford, MA). Para cada ensayo se utilizó un volumen de 250 ml, a diferentes rangos de concentraciones en mg/l de acetaminofén y de nonilfenol; se utilizó un reactor tipo Bach con una masa de catalizador de 2 g/l. La reacción se realizó bajo la inyección continua de oxígeno con una concentración de 100  $\text{cm}^3/\text{min}$ .

## Resultados

### Caracterización por difracción de rayos X (DRX)

Los datos del catalizador comercial (CAT1) son proporcionados por el fabricante; el cual está conformado por las fases cristalinas de anatasa (80 %) y rutilo (20%) y es activo en la región del ultravioleta (200-400 nm). Recientemente Aguilar et al., (2022), sintetizó catalizadores conformados por la fase anatasa bajo los procedimientos de sol gel sus resultados muestran que la fase anatasa es más activa para procesos de fotocatalisis. En este trabajo se controló la temperatura de calcinación para promover la formación de la fase anatasa y obtener el CAT2, los resultados por DRX; confirman la formación de la fase anatasa en un 100%. En la figura 1 se muestran los resultados por DRX de los catalizadores, se puede apreciar en el catalizador comercial CAT1 las señales en  $\theta = 28, 32, 42, 45$  atribuibles a la fase rutila, las cuales no se aprecian en CAT2, los picos presentes en  $\theta = 25, 38, 48, 55, 65$  se atribuyen a la anatasa presentes en ambos catalizadores.

**Figura 1** (a). Patrón de difracción de rayos X del catalizador CAT1, (b). Patrón de difracción de rayos X del catalizador CAT2



Fuente: Elaboración Propia

### Caracterización por reflectancia difusa (RD)

En la figura 2 (a) y 2 (b) se muestra las modificaciones de las propiedades físicas del titanio por la presencia de partículas de plata en la superficie, se muestra una mejora significativa de la absorción de la luz visible debido a la resonancia de plasmones, este comportamiento se debe a la interacción de las partículas metálicas con la luz incidente; así mismo el ancho de banda, se desplaza a la región del visible; estos valores muestran una variación con respecto al  $\text{TiO}_2$  sin modificar. En los espectros se muestra absorción de luz en longitudes de onda alrededor de los 400-600 nm, lo que indica que los catalizadores CAT 1 y CAT2 pueden ser utilizados en el rango de la luz visible.

Para el cálculo del ancho de banda se transformó la función del Kubelka Munk, utilizando el espectro de reflectancia difusa, los datos de longitud de onda se transforman a frecuencia mediante la relación  $\nu = \frac{c}{\lambda_g}$  y se representó  $(Abs * h\nu)^{\frac{1}{2}}$  en función de  $h\nu$ , mediante la extrapolación de una línea recta hacia el eje de las abscisas a partir de la gráfica generada, se determina el valor del band gap

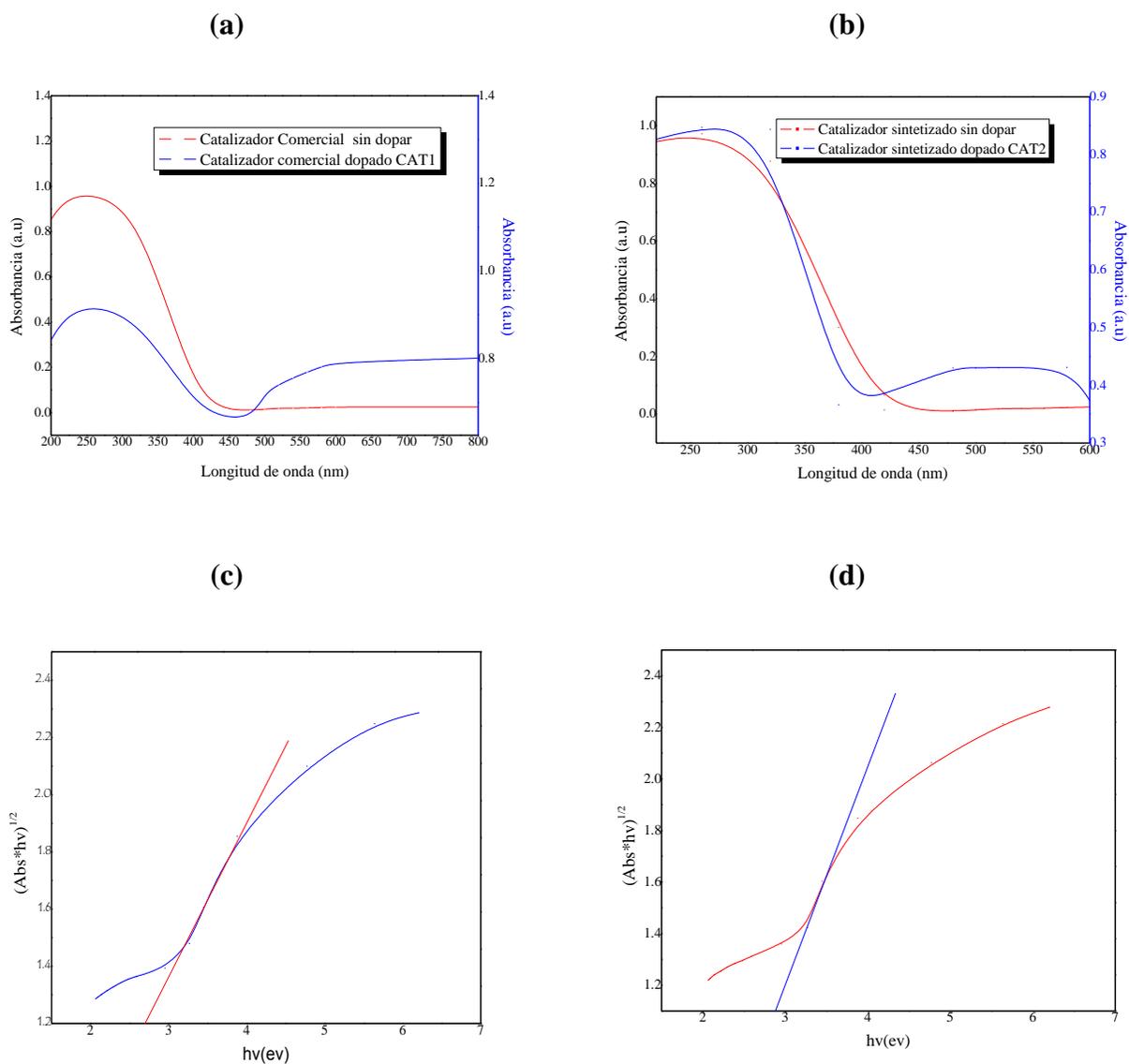
$$E_g = \frac{hc}{\lambda_g} = \frac{h(c/\lambda_g)}{1/\lambda_g} = h\nu$$

Donde:

- $\lambda_g$  = longitud de onda (nm)
- $h$  = constante de Planck
- $c$  = velocidad de la luz en el vacío

En la figura 2 (c) y 2 (d), se muestra la estimación del valor del ancho de banda, para el catalizador CAT1 el valor es de 2.8 ev y para el catalizador CAT2 este valor fue de 2.9 ev.

**Figura 2** (a). Patrón de reflectancia difusa del catalizador comercial sin dopar y dopado (CAT1), (b). Patrón de reflectancia difusa del catalizador sintetizado sin dopar y dopado (CAT2), (c) Estimación del ancho de banda del CAT1 (d)Estimación del ancho de banda del CAT2



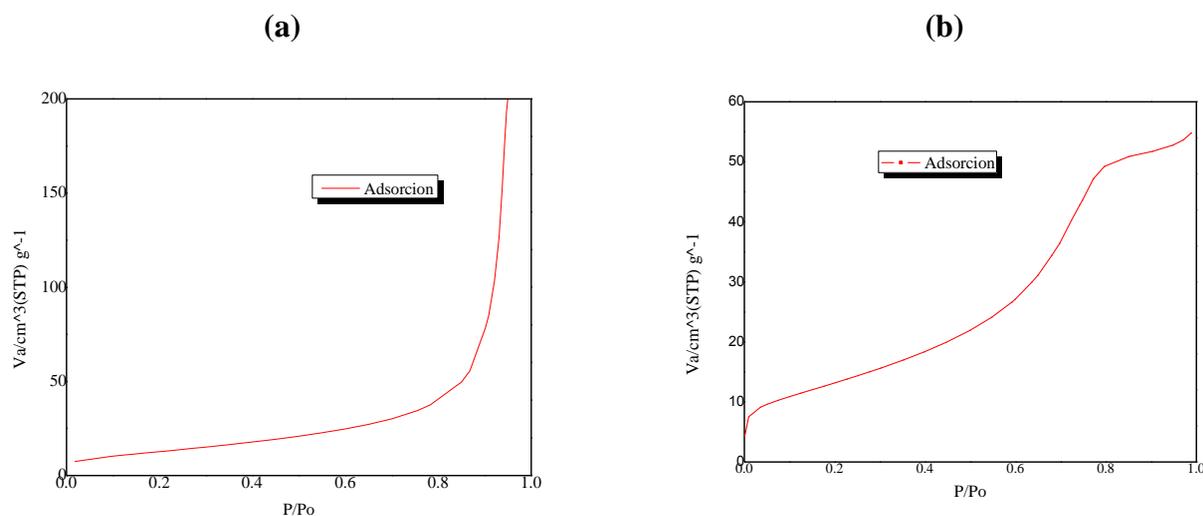
Fuente: Elaboración Propia

Diferentes estudios muestran que el uso de la plata como dopante para el óxido de titanio incide directamente en el incremento de su respuesta a la luz visible (Malagutti et al., 2008; Wang et al., 2008. Wodka et al., 2010), las ventajas que adquiere el sólido modificado con plata incrementan su actividad fotocatalítica (Wang et al., 2008).

### Area superficial

La eficiencia de las reacciones fotocatalíticas son inducidas por una deseable área específica en el catalizador y en el caso del  $\text{TiO}_2$  por su fase anatasa estabilizada, En la figura 3(a) se muestran los isotermas de adsorción del catalizador comercial dopado CAT1; característico de un isoterma tipo II, de acuerdo a la clasificación de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC), en la Tabla 1 se muestran los datos de su área superficial, tamaño y volumen de poro. Para CAT 2, los isotermas de adsorción que se muestran en la Figura 3 (b) siguen un comportamiento similar al de un isoterma tipo IV típico en materiales sólidos mesoporosos, Por otro lado, el ciclo de histéresis del isoterma se asemeja a uno de tipo  $\text{H}_2$  distintivo de materiales mesoporosos (Rimoldi et al., 2017).

**Figura 3** (a) catalizador comercial dopado con partículas de plata CAT1, (b) catalizador sintetizado dopado con partículas de plata CAT2



Fuente: Elaboración Propia

**Tabla 1** Valores estimados del catalizador comercial CAT1 y El catalizador sintetizado CAT 2

Tipo de catalizador	Área superficial, $S_{\text{BET}}$ ( $\text{m}^2/\text{g}$ )	Volumen de poros, $V_{\text{poros}}$ ( $\text{cm}^3/\text{g}$ )	Diámetro de poro promedio, $D_{\text{poros}}$ (nm)
CAT 2	51	0.0848	6.922
CAT 1	48	0.3648	30.668

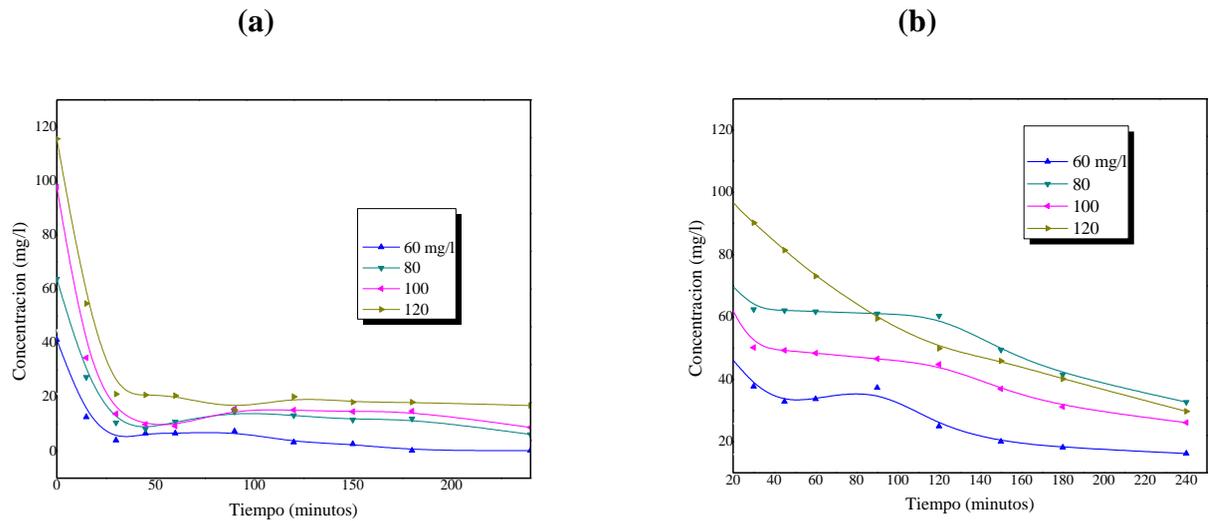
Los resultados muestran las diferencias en la estructura física del catalizador y en los parámetros del volumen y diámetro de poros, siendo el catalizador CAT2 un catalizador mesoporoso.

### Actividad fotocatalítica

En la figura 4 (a), se muestra el perfil de degradación fotocatalítica del nonilfenol con el catalizador CAT1, el perfil de degradación muestra una tendencia similar a una cinética de orden uno, con un porcentaje de conversión mayor del 50% en los primeros 50 minutos de la reacción, la formación de compuestos intermedios es mayor que con el uso del CAT2, aunque no se discute en este trabajo los mecanismos de reacción. En la figura 4 (b), se muestra el perfil de degradación del nonilfenol con el catalizador CAT 2, se puede observar que el comportamiento es similar a una cinética de orden cero, la velocidad de reacción es menor en comparación con el uso de CAT1, el mejor perfil de degradación para el nonilfenol es con el uso del catalizador CAT1. Aunque en este trabajo no se determinó la actividad estrogénica; en otros estudios se muestra que este factor se pierde con el inicio de la degradación fotocatalítica y que los productos intermedios de la degradación no presentaron esta actividad o fueron insignificantes (Nakashima et al., 2002).

La fotocatalisis podría aplicarse al tratamiento del agua para eliminar de manera efectiva los estrógenos naturales y sintéticos sin producir productos intermedios biológicamente activos.

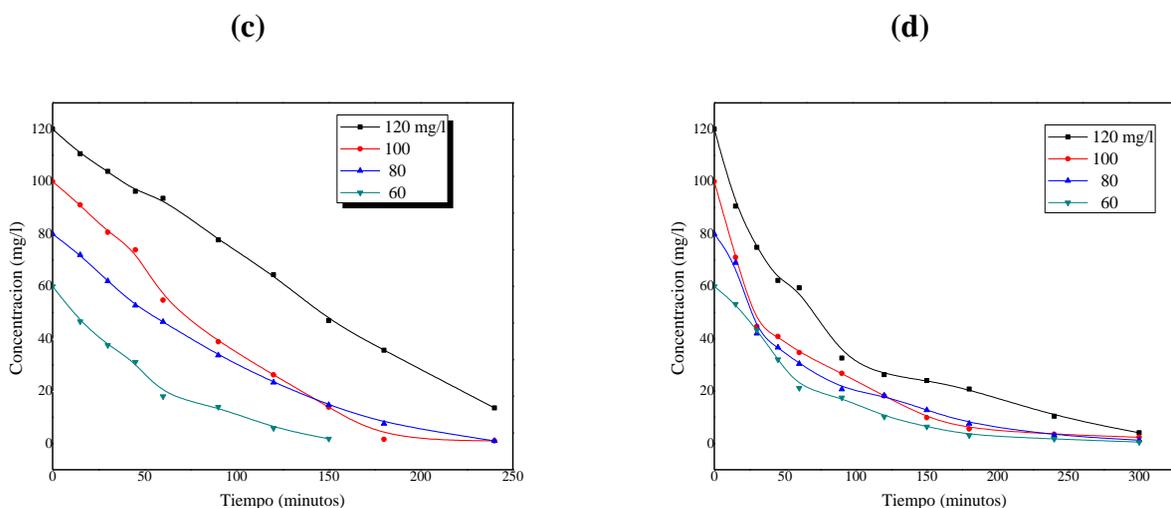
**Figura 4** (a) perfil de la degradación del nonilfenol seguida por HPLC con el catalizador comercial dopado con partículas de plata CAT1, (b) perfil de la degradación del nonilfenol seguida por HPLC con el catalizador sintetizado dopado con partículas de plata CAT2



*Fuente: Elaboración Propia*

En las figuras 4(c) y 4 (d), se muestra el perfil de degradación del acetaminofén; este fármaco es menos recalcitrante que el nonilfenol y muestra una tendencia de degradación similar a una reacción de orden uno, con porcentajes de conversión que superan el 90% con el uso del CAT2; las rutas de degradación son diferentes con el uso del CAT1, con el uso de este catalizador se alcanzaron porcentajes de conversión que superan al 80%, por lo que ambos catalizadores son idóneos para el tratamiento de este fármaco.

**Figura 4** (c) perfil de la degradación del acetaminofén seguida por HPLC con el catalizador comercial dopado con partículas de plata (CAT1), (d) perfil de la degradación del acetaminofén seguida por HPLC con el catalizador sintetizado y dopado con partículas de plata (CAT2)



*Fuente: Elaboración Propia*

## Conclusión

La síntesis controlada del catalizador CAT2 a partir de un precursor alcóxido mejoró considerablemente la estructura cristalina del catalizador al obtenerse la fase anatasa en comparación con el catalizador comercial Degussa P-25.

Las propiedades de ambos catalizadores CAT1 y CAT2 mejoraron considerablemente con la inclusión de las partículas de plata en su superficie mostrando un aumento en la capacidad de absorber en el rango de la luz visible, ambos catalizadores mostraron diferencias en su reducción de su ancho de banda con respecto al titanio comercial sin dopar, lo cual los hace aptos para ser utilizados en presencia de la luz visible en comparación con el catalizador comercial. Las diferencias en área superficial y tamaño de los poros mostraron que el CAT2 es un catalizador mesoporoso a diferencia de CAT1, cuyo tamaño de poros está considerado como semiporoso, los patrones de degradación del nonilfenol con ambos catalizadores muestran diferencias en la ruta de degradación, los porcentajes de conversión fueron superiores al utilizar CAT1, esta molécula es altamente recalcitrante y mostro un comportamiento similar al de una cinética de orden uno, en contraste con la utilización del CAT2 que mostro una tendencia similar al orden cero, aunque no se evaluó el efecto estrogénico hay evidencias que los procesos fotocatalíticos son aptos para reducir la capacidad estrogénica en esta molécula orgánica.

El catalizador CAT1 muestra mayores porcentajes de conversión, una mayor velocidad de reacción con la molécula del nonilfenol. Para el acetaminofén los porcentajes de conversión ambos catalizadores resultaron ser aptos para su degradación con tendencias similares al de una cinética de orden uno y con altos valores de conversión superando en ambos casos el 80% .

## Agradecimiento

A la Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP) y la Universidad Autónoma de nuevo León (UANL) por las facilidades para el uso de los equipos de Reflectancia difusa y Fisisorción de nitrógeno.

## Financiamiento

Este trabajo ha sido financiado por CONACYT, Subvención No. 169404

## Referencias

Abbas, H., Vannier, R.N., Mahmoud, T. (2022). Improving of photocatalytic activity of barium ferrate via bismuth and copper co-doping for degradation of paracetamol under visible light irradiation. *J. Environ. Sci.* 112, 331-342. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2021.05.008>.

Aguilar, C. A., de la Cruz, A., Montalvo, C., Ruiz-Marin, A., Oros-Ruiz, S., Figueroa-Ramirez, S. J., Cordova-Quiroz, V. (2022). Effect of kinetics on the photocatalytic degradation of acetaminophen and the distribution of major intermediate with anatase-Ag synthesized by sol gel under visible irradiation. *Front. Environ. Sci.* 10:943776. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2022.943776>

Al-Gharibi, M. A., Kyaw, H. H., Al-Sabahi, J. N., Myint, M. T. Z., Al-Sharji, Z. A., Al-Abri, M. Z. (2021). Silver nanoparticles decorated zinc oxide nanorods supported catalyst for photocatalytic degradation of paracetamol. *Mater. Sci. Semicond. Process.* 134, 105994. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2021.105994>.

Aminzadeh, H., Mohaddeseh, S., Iman, M., Hassan, S. (2021). Assembly of CuO nanorods onto poly (glycidylmethacrylate)/polyaniline core-shell microspheres: Photocatalytic degradation of paracetamol. *Appl. Organomet. Chem.* 35,1-12. <https://doi.org/10.1002/aoc.6423>

Bedner, M., & MacCrehan, W. A. (2006). Transformation of acetaminophen by chlorination produces the toxicants 1,4-benzoquinone and N-acetyl-p-benzoquinone imine. *Environ. Sci. Technol.* 40(2), 516–522. <https://doi.org/10.1021/es0509073>

- Blanco, G., Blesa, M., Sanchez B. (2004). Eliminación de contaminantes por fotocatalisis heterogénea: texto colectivo elaborado por la Red CYTED VIII-G, Usos de óxidos semiconductores y materiales relacionados para aplicaciones ambientales y ópticas; editado por Miguel A. Blesa y Benigno Sánchez. Madrid España.
- Chan, R., Chart, C., Wilai, C., Alongkot, B., Phitsanu, T. (2022). Occurrence of antibiotics in typical pig farming and its wastewater treatment in Thailand. *Emerg. Contam.* 8, 21-29. <https://doi.org/10.1016/j.emcon.2021.12.003>
- Chopra, S., Kumar, D. (2020). Biodegradation and kinetic analysis of acetaminophen with co-culture of bacterial strains isolated from Sewage wastewater. *Curr. Microbiol.* 77, 3147-3157. <https://10.1007/s00284-020-02137-6>
- Jannatun, Z., Ufana, R. (2020). Microwave-Assisted Degradation of Paracetamol Drug Using Polythiophene-Sensitized Ag-Ag<sub>2</sub>O Heterogeneous Photocatalyst Derived from Plant Extract. *ACS Omega.* 5 (27), 16386-16394. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00405>
- Kabra, K., Chuadhary, R., Sawhney, R.L (2004). Treatment of Hazardous Organic and Inorganic Compounds Through Aqueous-Phase. Photocatalyst: A review. *Ind. Eng. Chem.* 43, 7683-7696. <https://doi.org/10.1021/ie0498551>
- Kolpin, D., Furlong, E. T., Meyer, M.T., Thurman, E.M., Zaugg, S.D., Barber, L.B (2002). Pharmaceuticals, Hormones and Organic Wastewater contaminants in US Streams, 1999-2000: a national reconnaissance. *Environ. Sci. Technol.* 36, 1202-1211. <https://doi.org/10.1021/es011055j>
- Liga, M.V., Bryant, E.L., Colvin, V.L., Li, Q (2011) virus inactivation by silver doped titanium dioxide nanoparticles for drinking water treatment. *Wat. Res.* 45, 535-544. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2010.09.012>
- López, K., Guzmán-Mar, J., Saldarriaga, H.A., Murillo, M., Hinojosa, L., Villanueva, M. (2021). Occurrence and seasonal distribution of five selected endocrine disrupting compounds in wastewater treatment plants of the Metropolitan área of Monterrey, Mexico: the role of water quality parameters. *Environ. Pollut.* 269, 116223. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.116223>
- Malagutti, A., Henrique, A.J.L., Mourao, H.A.J.L, Garbin, J.R., Ribeiro, C. (2008). Deposition of TiO<sub>2</sub> and Ag: TiO<sub>2</sub> thin films by the polymeric precursor method and their application in the photodegradation of textile dyes. 90, 205-212. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2009.03.014>
- Nakashima, T., Iguchi, T., Kubota, Y., & Fujishima, A. (2002). 17 beta-estradiol degradation by TiO<sub>2</sub> photocatalysis as a means of reducing estrogenic activity. *Environmental science & technology.* 36(19), 4175-4181. <https://doi.org/10.1021/es011500a>
- Rimoldi, L., Meroni, D., Falletta, E., Ferretti, A. M., Gervasini, A., Cappelletti, G., & Ardizzone, S. (2017). The role played by different TiO<sub>2</sub> features on the photocatalytic degradation of paracetamol. *Applied surface science*, 424, 198-205. <https://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.03.033>
- Ronderos, J.G., Saldarriaga, H., Murillo, MA., Alvarez, L., Vergara, J., Guerrero, J.A. (2022). Distribution and Estrogenic Risk of Alkylphenolic Compounds, Hormones and Drugs Contained in Water and Natural Surface Sediments, Morelos, Mexico. *Separations.* 9, 19. <https://doi.org/10.3390/separations9010019>
- Stathatos, E., Petrova, T., Lianos, P. (2001). Study of the Efficiency of Visible-Light Photocatalytic Degradation of Basic Blue Adsorbed on Pure and Doped Mesoporous Titania Films *Langmuir* 17, 5025-5030. <https://doi.org/10.1021/la0103620>
- Wang, H., Lin, H., Kuo, C., Cheng, Y., & Yeh, Y. (2008). Synthesis and photocatalysis of mesoporous anatase TiO<sub>2</sub> powders incorporated Ag nanoparticles. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 69, 633-636. <https://doi.org/10.1016/j.jpics.2007.07.052>

Wilkinson, J.L., Alistair, B.A., Kolpin, D.W., Kenneth, M. Y. Racliffe, W.S., Galbán-Malagón C. et al. (2022). Pharmaceutical pollution of the world's rivers. *PNAS*. 119 (8), e2113947119. <https://doi.org/10.1073/pnas.2113947119>

Wodka, D., Bielańska, E., Socha, R. P., Elzbieciak-Wodka, M., Gurgul, J., Nowak, P., Warszyński, P., & Kumakiri, I. (2010). Photocatalytic activity of titanium dioxide modified by silver nanoparticles. *ACS applied materials & interfaces*, 2(7), 1945–1953. <https://doi.org/10.1021/am1002684>

## Capítulo 4 Empleo de sedimentos de jagüey en una celda de combustible microbiana béntica para la generación de electricidad

### Chapter 4 Jagüey sediments in a benthic microbial fuel cell for electricity generation

FUENTES-ALBARRÁN, María del Carmen†\*, ALARCÓN-HERNÁNDEZ Fidel Benjamín, LORENZANA-RAMÍREZ Ana Fernanda y GADEA-PACHECO José Luis

*Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Escuela de Estudios Superiores de Xalostoc. Av. Nicolás Bravo s/n, Parque Industrial Cuautla, C.P. 62717 Xalostoc, Ayala, Morelos, México.*

ID 1<sup>er</sup> Autor: *María del Carmen Fuentes-Albarrán* / **ORC ID** 0000-0003-1308-1332, **CVU CONACYT ID:** 171814

ID 1<sup>er</sup> Coautor: *Fidel Benjamín Alarcón-Hernández* / **ORC ID** 0000-0002-2465-0898, **CVU CONACYT ID:** 131028

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *Ana Fernanda Lorenzana Ramírez* / **ORC ID** 0000-0002-4500-8634, **CVU CONACYT ID:** 1094667

ID 3<sup>er</sup> Coautor: *José Luis Gadea-Pacheco* / **ORC ID** 0000-0001-9341-9289, **CVU CONACYT ID:** 160429

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.29.35

M. Fuentes, F. Alarcón, A. Lorenzana y J. Gadea

\*carmen.fuentes@uaem.mx

O. Benavides & A. Flores (VV. AA.). Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente. Handbooks- TII- ©ECORFAN-Mexico, 2022.

## Resumen

En este trabajo se utilizaron sedimentos provenientes de un jagüey de una localidad del estado de Morelos, México, en un dispositivo de celda de combustible microbiana béntica a escala laboratorio. La investigación se efectuó en tres etapas, la primera consistió en la recolección de los sedimentos y el ensamble de la celda, en la segunda etapa se monitoreó la aclimatación del dispositivo. Finalmente, en la tercera etapa se caracterizó la celda de combustible mediante curvas de polarización y potencia para evaluar su desempeño. La celda obtuvo un voltaje estable a los 8 días de funcionamiento, el sistema alcanzó un máximo pico de potencia de  $0.67 \text{ mW/m}^2$  con una densidad de corriente de  $0.96 \text{ mA/m}^2$ , mostrando que los sedimentos de jagüey son factibles para la producción de electricidad en estos dispositivos.

## Celda de combustible microbiana, Sedimentos, Electricidad

### Abstract

In this work, sediments from a jagüey in a locality in the state of Morelos, Mexico, were used in a laboratory-scale benthic microbial fuel cell device. The investigation was carried out in three stages, the first consisted of the collection of the sediments and the assembly of the cell, in the second stage the acclimatization of the device was monitored. Finally, in the third stage, the fuel cell was characterized by means of polarization and power curves to evaluate its performance. The cell obtained a stable voltage after 8 days of operation, the system reached a maximum power peak of  $0.67 \text{ mW/m}^2$  with a current density of  $0.96 \text{ mA/m}^2$ , showing that the jagüey sediments are feasible for the production of electricity on these devices.

## Microbial fuel cell, Sediment, Electricity

### 1. Introducción

En la actualidad, los combustibles fósiles constituyen el 80% de la energía que se usa a nivel mundial (32% petróleo, 21% gas y 27% carbón), sin embargo, las reservas de estos recursos son limitadas, por lo tanto, no pueden indefinidamente sostener la economía global. Aunada a esta problemática, el uso excesivo de combustibles fósiles ha contribuido al cambio climático, debido a las altas concentraciones de gases de efecto invernadero que se emiten a la atmósfera (Logan, 2008, Ferrari, 2013, Andrade et al., 2017). Para mitigar el daño ambiental, es necesario impulsar el uso de fuentes de energía limpias.

La tecnología de celdas de combustible microbianas (CCMs), consiste en dispositivos electroquímicos que convierten energía química en energía eléctrica, empleando microorganismos como biocatalizadores, y ofrecen la posibilidad de generar bioelectricidad a partir de residuos orgánicos y biomasa renovable (Lovley, 2006, Wall et al., 2008). El interés en estas investigaciones, ha llevado al desarrollo de CCMs que puedan aprovechar la energía de los sustratos contenidos en ambientes naturales tales como sedimentos acuáticos, en las llamadas celdas de combustible microbianas bénticas (CCMB) o de sedimentos. En una CCMB los sedimentos acuáticos actúan como medio anódico rico en nutrientes y están equipados con una comunidad compleja de microorganismos, incluidos microorganismos electrogénicos. (Guzman et al., 2010). Las CCMB generan corriente eléctrica a partir de gradientes redox naturales que comúnmente ocurren a través de la interfaz sedimento-agua.

El principio de funcionamiento de una CCMB es sencillo, consiste en un circuito en el cual se colocan electrodos inertes, pero eléctricamente conductores, el ánodo en una zona anóxica mientras que el cátodo en una zona óxica. Los electrodos se conectan a través de una carga, como una resistencia externa o un potencióstato (en aplicaciones de investigación) o un sistema de sensores (en aplicaciones o demostraciones de campo). Los electrones resultantes de la actividad metabólica microbiana se transfieren de los donantes de electrones al ánodo y fluyen a través de la carga al cátodo, donde se lleva a cabo la reducción del oxígeno disuelto en agua (Girguis et al., 2010). Las CCMB tienen aplicaciones potenciales para impulsar sensores en ambientes marinos para monitorear, por ejemplo; temperatura, salinidad, patrones de marea, la presencia de algas y otras formas de vida, así como patrones de migración de peces, contaminación orgánica por la producción del petróleo y compuestos metálicos de otros procesos industriales (Scott et al., 2008).

Las CCMB poseen ventajas respecto de los dispositivos y sensores oceanográficos tradicionales, ya que estos últimos se alimentan mediante baterías o fuentes similares, que se agotan y necesitan reemplazo constante, mientras que las celdas bénticas son amigables con el ambiente y requieren bajo mantenimiento, siendo sistemas bioelectroquímicos que pueden aprovechar la energía eléctrica continua de ambientes marinos.

Los dispositivos de CCMB pueden emplear sedimentos de diferentes cuerpos acuáticos tales como; mares, ríos y lagos (Ryckelynck et al., 2005, Mora y Bravo 2017, Joiner et al., 2020, Reimers al., 2022). Los jagüeyes, también conocidos como balsas, embalses, estanques o trampas de agua, es el término genérico que se emplea para designar a depresiones del terreno o pequeñas y medianas presas artificiales, que permiten almacenar el agua proveniente de los escurrimientos superficiales y destinarla a fines pecuarios, o a suplir las necesidades humanas. Existen diferentes formas de llenado, en Morelos se realiza con agua de escurrimiento de lluvias o de manantiales (SAGARPA, 2017, Guzmán 2018).

En este trabajo se investigó la factibilidad de utilizar sedimentos provenientes de un jagüey, en un dispositivo de celda de combustible microbiana béntica a escala laboratorio para la producción de electricidad. El trabajo se desarrolló en tres etapas, en la primera, se recolectaron los sedimentos del cuerpo acuático y se realizó el ensamble de la celda, posteriormente se monitoreó el tiempo de aclimatación del dispositivo. Finalmente, en la tercera etapa se caracterizó la celda de combustible mediante curvas de polarización y potencia para evaluar su desempeño.

## 2. Desarrollo

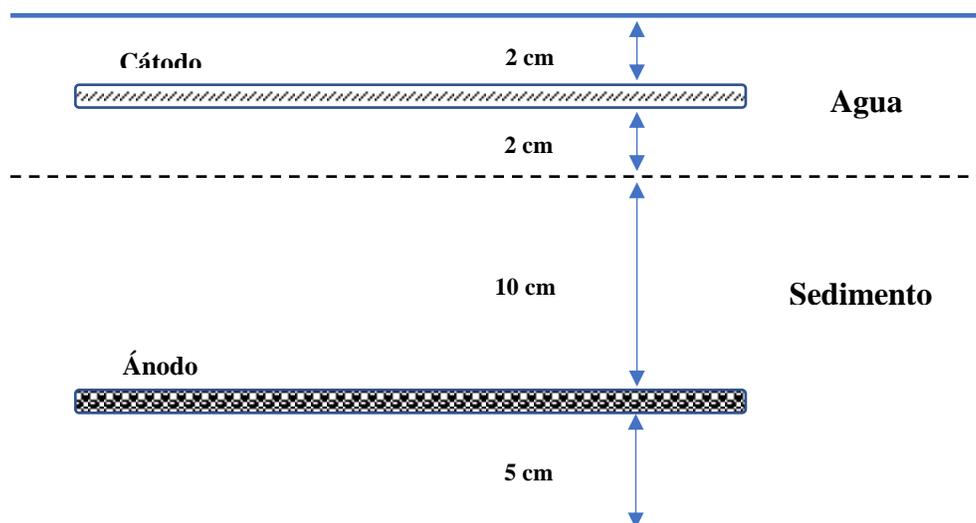
### 2.1. Recolección de sedimentos

Los sedimentos fueron recolectados en un jagüey de una localidad del estado de Morelos, México. Para lo cual se escarbó a una profundidad de 30 cm aproximadamente, y a partir ahí se tomaron los sedimentos colocándolos en un recipiente y manteniéndose cerrados hasta su utilización. Los microorganismos contenidos en los sedimentos sirvieron como biocatalizadores en la producción de electricidad en la celda, mientras que la materia orgánica contenida de manera natural sirvió como fuente de carbono para los microorganismos.

### 2.2. Configuración y operación de la celda de combustible béntica.

La celda de combustible microbiana béntica tuvo una configuración tipo estanque. El sistema simuló las interfases sedimentos-superficie acuática de un ambiente natural. El dispositivo consistió en una pecera de vidrio con un volumen total de  $0.014 \text{ m}^3$ . Para el ánodo se empleó un electrodo de fibra de carbón, mientras que para el cátodo se utilizó carbón Veil (Fibre Glast Developments Corporation), ambos electrodos tuvieron un área de  $0.09 \text{ m}^2$ . Para la conexión al exterior se empleó alambre de cobre barnizado. La Figura 2.1 muestra un esquema del montaje de la celda.

**Figura 2.1** Esquema de las interfases sedimento-agua en la CCMB



Fuente de consulta: Elaboración Propia

En la CCMB se incluyeron dos segmentos; sedimentos acuosos y agua. En el dispositivo se colocó una capa de sedimentos de 5 cm y enseguida el ánodo, sobre éste se colocó una capa más de sedimentos de 10 cm, esto con el objetivo de mantener el ánodo bajo condiciones anaerobias, además de servir como separador natural entre las fases del sistema. El cátodo se colocó paralelo al ánodo a una distancia aproximada de 14 cm, quedando suspendido en el agua mediante un sujetador de plástico a la pecera. Finalmente, el cátodo se cubrió con una última capa de agua. El aire se suministró al cátodo por difusión natural a la superficie del agua. Todos los experimentos se llevaron a cabo a temperatura ambiente.

### 2.3. Adquisición de datos y análisis electroquímicos

La CCMB se mantuvo en operación durante un período de 30 días, usando la materia orgánica contenida en los sedimentos. Durante el tiempo de colonización bacteriana, se monitoreo el voltaje a circuito abierto (VCA) en el sistema, una vez que la celda alcanzó un voltaje estable se estudió el desempeño de la celda. En este trabajo se utilizó el método de curva de polarización para evaluar el desempeño electroquímico de la celda, para lo cual se empleó una resistencia externa ( $R_{ext}$ ), variándola en un intervalo de 500  $\Omega$  a 10 k $\Omega$  y registrando el Voltaje ( $E_{CCMB}$ ) correspondiente obtenido en la celda. Para cada par de valores ( $\Omega$ -V) obtenidos experimentalmente, se calculó la corriente de acuerdo con la ley de ohm:

$$I = \frac{E_{CCMB}}{R_{ext}} \quad (1)$$

La curva de polarización se obtuvo graficando el voltaje de la celda vs la corriente. Otro método utilizado para evaluar el desempeño de la CCMB es el máximo pico de potencia (MPP), el cual se obtiene a partir de una curva de polarización, graficando la densidad de potencia vs la densidad de corriente, tomando en cuenta que la potencia de la celda ( $P_{CCMB}$ ) se define como:

$$P_{CCMB} = \frac{E^2_{CCMB}}{R_{ext}} \quad (2)$$

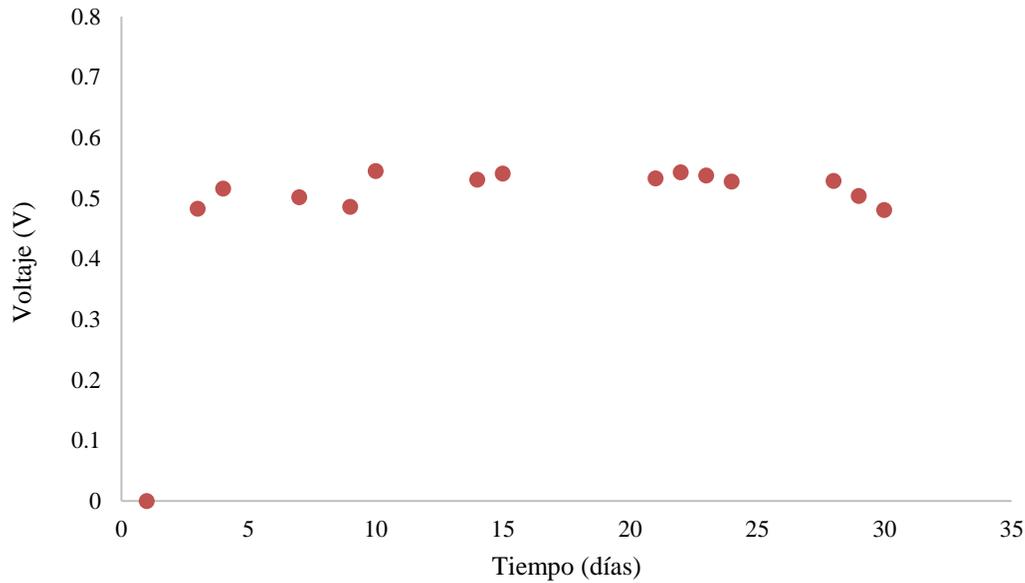
La densidad de potencia obtenida en este estudio se normalizó al área del ánodo ( $mWm^{-2}$ )

## 3. Resultados

### 3.1. Aclimatación

La celda béntica se puso en marcha, empleando los sedimentos y agua provenientes del jaguey. En esta etapa se llevó a cabo la colonización del ánodo por los microorganismos contenidos en los sedimentos. En el Gráfico 3.1 muestra el tiempo de colonización bacteriana en función del voltaje (monitoreado a circuito abierto). Como se puede apreciar en la gráfica, el voltaje de la celda incrementó durante los primeros 3 días de operación, alcanzando un voltaje de  $\sim 0.4$  V incrementándose ligeramente hasta los 10 días de operación, y manteniéndose estable durante los siguientes 20 días en un voltaje de  $\sim 0.5$  V, lo cual sugirió que el ánodo había sido colonizado.

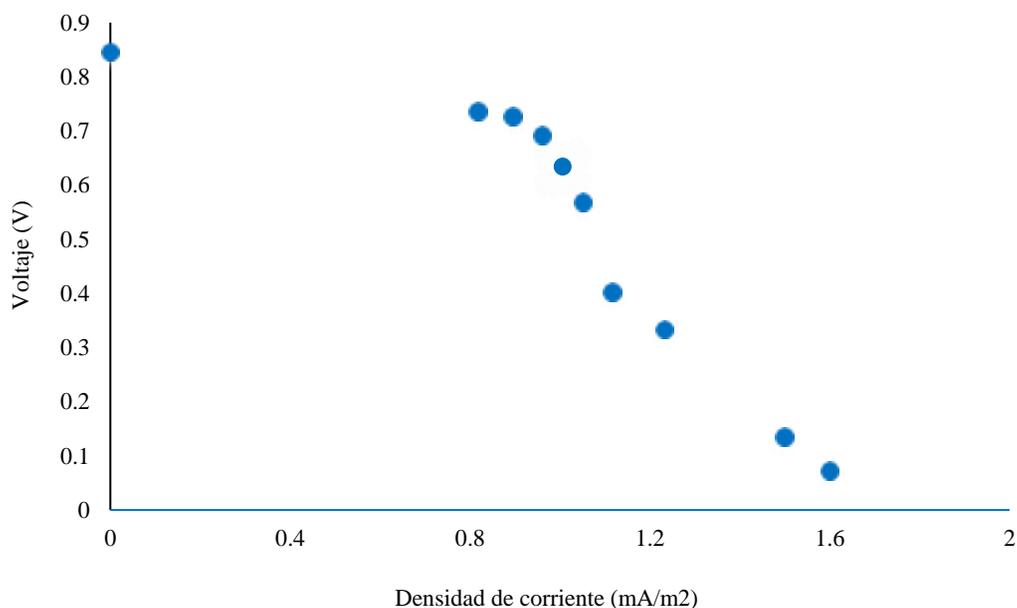
En ambientes acuáticos naturales, están presentes diferentes tipos de comunidades microbianas, éstas cooperan en la degradación de materia orgánica, siendo los microorganismos fermentativos los encargados de romper inicialmente la materia orgánica compleja en acetato y otros compuestos, que otras especies de bacterias pueden oxidar a dióxido de carbono (Lovley 2006). En este estudio no se examinó el consorcio que colonizó el ánodo de la CCMB, sin embargo, en aguas dulces, es probable la presencia de especies *Geobacter* en los sedimentos utilizados.

**Gráfico 3.1.** Tiempo de aclimatación de la CCMB

*Fuente de consulta: Elaboración propia*

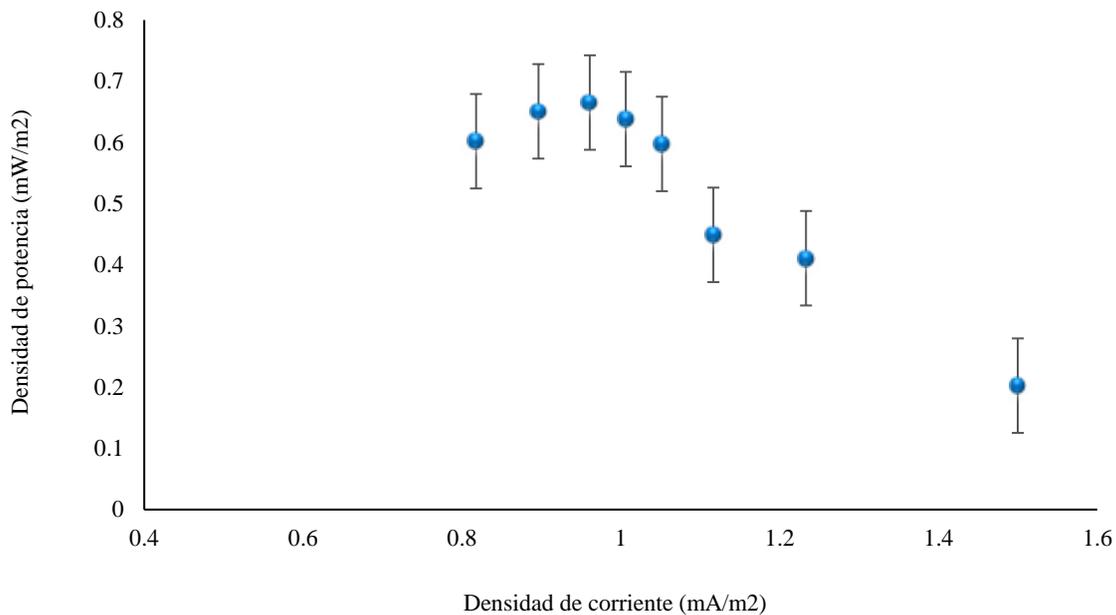
### 3.2. Curva de polarización y potencia de la CCMB

La curva de polarización obtenida en la CCMB se muestra en el Gráfico 3.2. Se puede observar que la celda alcanzó un voltaje a circuito abierto de 0.85 V, decayendo ligeramente en un intervalo de 0.6 y 0.7 V, y disminuyendo casi linealmente en potenciales menores a 0.5 V, lo cual es evidencia de la existencia de pérdidas óhmicas. Estas pérdidas son las más importantes en el diseño de una celda de combustible microbiana béntica, ya que es esta región de la curva donde se ubica la máxima producción de potencia que alcanza una CCMB. Las pérdidas óhmicas pueden minimizarse reduciendo la distancia entre los electrodos, incrementando la conductividad de la solución y capacidad de buffer y asegurando un buen contacto entre el circuito y los electrodos (Logan, 2008).

**Gráfico 3.2.** Curva de polarización

*Fuente de consulta: Elaboración Propia*

En el Gráfico 3.3 se muestra la densidad de potencia obtenida en la celda como una función de la densidad de corriente. Se puede observar que se obtiene un máximo pico de potencia de 0.67 mW/m<sup>2</sup> con una densidad de corriente de 0.96 mA/m<sup>2</sup>, lo cual muestra que es factible utilizar sedimentos de un jagüey para la producción de energía limpia con un dispositivo de celda de combustible microbiana béntica.

**Gráfico 3.3** Densidad de potencia

*Fuente de consulta: Elaboración Propia*

En otro estudio (Gatti 2016), utilizó sedimentos de río en una celda de dos compartimientos empleando electrodos de grafito, obteniendo una densidad de potencia de  $3.57 \text{ mW/m}^2$  con una densidad de corriente de  $20 \text{ mA/m}^2$ . Por otra parte (Fuentes, 2013), obtuvo una máxima densidad de potencia de  $0.72 \text{ mW/m}^2$  con una densidad de corriente de  $3.07 \text{ mA/m}^2$ , en una celda de combustible béntica utilizando sedimentos de una laguna. Los resultados obtenidos en este estudio muestran que es factible utilizar sedimentos de un jagüey para la producción de electricidad.

### Agradecimiento

Se agradece a la Escuela de Estudios Superiores de Xalostoc, perteneciente a la Universidad del Estado de Morelos, por las facilidades otorgadas para la realización de este trabajo.

### Conclusiones

En este trabajo se emplearon sedimentos de un jagüey en un dispositivo de celda de combustible microbiana béntica tipo estanque, aprovechando la materia orgánica y los microorganismos contenidos en estos sedimentos para la producción de electricidad. La CCMB se mantuvo en operación durante un período de 30 días, funcionando únicamente con la materia orgánica contenida en los sedimentos. El sistema alcanzó una máxima densidad de potencia de  $0.67 \text{ mW/m}^2$  con una densidad de corriente de  $0.96 \text{ mA/m}^2$ .

En este estudio se mostró que es factible el uso de sedimentos de un jagüey para la producción de electricidad en una celda béntica. El desafío de estos dispositivos es el diseño ingenieril para obtener un mejor desempeño.

### Sugerencias para futuros trabajos

En este trabajo se planteó la propuesta de usar sedimentos provenientes de un jagüey en una celda de combustible microbiana béntica para la producción de electricidad, sin embargo, la producción de potencia del dispositivo aun es baja, así que para futuros trabajos se buscará incrementarla. Es importante monitorear el desempeño del sistema por un mayor período de tiempo para examinar el tiempo de operación de la celda con la materia orgánica contenida en los sedimentos, ya que esta investigación se llevó a cabo a escala laboratorio.

## Referencias

- Andrade, H., J., Artega, C., C., Segura, M., A. (2017). Emisión De Gases De Efecto Invernadero Por Uso De Combustibles fósiles En Ibagué, Tolima (Colombia). *Ciencia Y Tecnología Agropecuaria*, 18 (1), 103-112. DOI: [http://dx.doi.org/10.21930/rcta.vol18\\_num1\\_art:561](http://dx.doi.org/10.21930/rcta.vol18_num1_art:561)
- Ferrari, L. (2013). Energías fósiles: diagnóstico, perspectivas e implicaciones económicas. *Revista Mexicana de Física*, 59 (2), 36-43.
- Fuentes, A., M., C. (2013). Producción de bioelectricidad en dos diseños de celdas de combustible microbianas, evaluando el desempeño de un cátodo de carbón sin catalizar y catalizado con MnO<sub>2</sub>. Tesis de doctorado, Centro de investigaciones en ingeniería y ciencias aplicadas, Universidad Autónoma del estado de Morelos, México.
- Gatti, M. N., Quiñones, F. & Milocco, R. H. (s. f.). Estudio de diferentes celdas de combustible microbianas para la generación de energía a partir de residuos orgánicos de efluentes líquidos, researchgate.net. Recuperado 25 de febrero de 2021.
- Girguis, P., R., Nielsen, M., E., Reimers, C., E. (2010). *Fundamentals of Benthic Microbial Fuel Cells: Theory, Development, and Applications In Bioelectrochemical Systems*. First edition. Springer Verlag Press.
- Guzmán, J., J., Cookea, K., G., Gaya, M., O., Radachowskya, S., E., Girguisb, P., R., Chiua, M., A. (2010). Benthic Microbial Fuel Cells: Long-Term Power Sources for Wireless Marine Sensor Networks. Published in Proceedings: SPIE Defense, Security, and Sensing, 1-12. <https://doi.org/10.1117/12.854896>
- Guzmán, M., A., D., L., A. (2018). Jagüeyes, patrimonio morelense para la sustentabilidad. *Inventio*, la génesis de la cultura universitaria en Morelos, 29-37.
- Joiner, K., L., Tukeman, G., L., Obraztsova, A., Y., Arias, Y., M. (2020). Impact of sediment parameters in the prediction of benthic microbial fuel cell performance. *The Royal Society of Chemistry*, 10, 26220–26228. <https://doi.org/10.1039/d0ra03459b>
- Logan, B., E. (2008). *Microbial Fuel Cells*. John Wiley & Sons Inc. New Jersey, USA.
- Lovley, D., R. (2006). Bug juice: harvesting electricity with microorganisms. *Nature reviews microbiology*, 4, 497-508. <http://dx.doi.org/10.1038/nrmicro1442>
- Mora, A. y Bravo, E. (2017). Evaluation of the Electrogenic potential of coastal sediments of la Azufrada beach, Gorgona Island. *Revista de ciencias*, 21 (1).
- Reimers, C., E., Wolf, M., Alleau, Y., Cheng, L. (2022). Benthic microbial fuel cell systems for marine applications. *Journal of power sources*, 522, 1-8. DOI:10.1016/j.jpowsour.2022.231033
- Ryckelynck, N., Stecher, H., A., Reimers, C., E. (2005). Understandig the anodic mechanism of a seafloor fuel cell: interactions between geochemistry and microbial activity. *Biogeochemistry*, 76, 113-139. DOI 10.1007/s10533-005-2671-3
- Scott, K., Cotlarciuc, I., Lakerman, J., B., Browning, D. (2008). Power from marine sediment fuel cells: the influence of anode material. *Journal of Applied Electrochemistry*, <https://doi.org/10.1007/s10800-008-9561-z>
- Secretaría de Agricultura, Ganadería, Desarrollo Rural, Pesca y Alimentación, SAGARPA (2017). Diseño y construcción de jagüeyes., Segunda Edición, México. [https://0201.nccdn.net/1\\_2/000/000/170/8fa/Dise--o-y-Construcci--n-de-Jagueyes.pdf](https://0201.nccdn.net/1_2/000/000/170/8fa/Dise--o-y-Construcci--n-de-Jagueyes.pdf). Fecha de consulta: 30 de octubre 2022.
- Wall, J., D., Harwood, C., S., Demain, A. (2008). *Bioenergy*, ASM Press, Washington, DC. DOI:10.1128/9781555815547

## Capítulo 5 Propuesta para detección de vibraciones y/o desbalance en un sistema rotodinámico a partir de redes neuronales

### Chapter 5 Proposal for detection of vibrations and/or unbalance for a rotodynamic system using neural networks

SANCHEZ-ARROYO, Ian Arturo†, RODRIGUEZ-BLANCO, Marco Antonio\*, VAZQUEZ-AVILA José Luis y PALACIOS-GONGORA, Iris Susana

*Universidad Autónoma del Carmen – Facultad de Ingeniería.*

ID 1<sup>er</sup> Autor: *Ian Arturo, Sanchez-Arroyo* / **ORC ID:** 0000-0001-6673-075X, **Researcher ID Thomson:** GXH-3990-2022, **CVU CONACYT ID:** 1143096

ID 1<sup>er</sup> Coautor: *Marco Antonio, Rodriguez-Blanco* / **ORC ID:** 0000-0003-3641-6895, **Researcher ID Thomson:** U-6476-2017, **CVU CONACYT ID:** 51908

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *Josue Luis, Vazquez-Avila* / **ORC ID:** 0000-0002-9654-2431, **Researcher ID Thomson:** P-7994-2019, **CVU CONACYT ID:** 102415

ID 3<sup>er</sup> Coautor: *Iris Susana, Palacios-Gongora* / **ORC ID:** 0000-0003-1702-1761, **Researcher ID Thomson:** GXZ-6460-2022, **CVU CONACYT ID:** 1137651

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.36.48

I. Sánchez, M. Rodríguez, J. Vázquez e I. Palacios

\*110768@mail.unacar.mx

O. Benavides & A. Flores (VV. AA.). Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente. Handbooks- TII- ©ECORFAN-Mexico, 2022.

## Resumen

Las maquinas rotativa son muy importancia a nivel industrial para garantizar la flexibilidad, agilidad y precisión de los procesos tanto para aplicaciones críticas y no-críticas para la producción y manufactura de productos, lo cual salvaguardar la integridad humana y económica. En este sentido, garantizar el correcto funcionamiento de los equipos mediante la detección de fallas complementa un buen plan de mantenimiento preventivo o predictivo, esto alargar la vida útil de los equipos y evitar paro de producción. Actualmente existen varias técnicas de detección de vibraciones y/o desbalance para sistemas rotodinámicos como son motores, generadores, cajas de engranes entre otras, las cuales se basan en mediciones mecánicas mediante acelerómetros y/o proxímetros o mediciones eléctricas por medio de sensores de corriente. Las técnicas de procesamientos para diagnóstico de fallas por vibraciones y/o desbalance comúnmente se basan en el modelo del proceso o en señales obtenidas. Sin embargo, los modelos de los sistemas rotodinámicos son comúnmente no lineales, por lo que el modelo del sistema suele ser muy complejo y variante en el tiempo. Entonces las técnicas de procesamiento basados en señales utilizando métodos no lineales es la mejor opción de estudio. Existen técnicas de procesamiento de señales orientadas a sistemas rotodinámicos que permiten detectar fallas en los baleros y por desbalance del rotor, pero necesitan dos tipos de sensores para distinguir la falla específica y el enfoque está orientado para sistemas lineales lo cual incrementa el costo de la instrumentación y limita el rango de precisión respectivamente. En este trabajo se pretende utilizar la medición de señales vibratorias con solo acelerómetros para distinguir la falla entre baleros y/o desbalance empleando un enfoque no lineal basado en redes neuronales aplicado a un sistema rotodinámico, el cual será entrenado para diversas condiciones de operación libre de falla y bajo falla.

## Vibraciones, Desbalance, Diagnóstico de fallas, Redes neuronales, Sistemas rotodinámicos

### Abstract

Rotary machines are very important at an industrial level to guarantee the flexibility, agility and precision of the processes for both critical and non-critical applications for the production and manufacture of products, which safeguard human and economic integrity. In this sense, guaranteeing the correct functioning of the equipment by detecting faults complements a good preventive or predictive maintenance plan, this extends the useful life of the equipment and avoids production stoppage. Currently there are several vibrations and unbalance detection techniques for rotodynamic systems such as motors, generators, gearboxes, among others, which are based on mechanical measurements using accelerometers and/or proximeter or electrical measurements using current sensors. Processing techniques for fault diagnosis due to vibrations and/or unbalance are commonly model-based or signals-based. However, the models of rotodynamic systems are commonly nonlinear, so the system model is often very complex and time-varying. Then signal-based processing techniques using nonlinear methods is the best study option. There are signal processing techniques oriented to rotodynamic systems that allow detecting faults in the bearings and due to rotor unbalance, but they need two types of sensors to distinguish the specific fault and the approach is oriented towards linear systems, which increases the cost of instrumentation. and limits the precision range respectively. In this work it is intended to use the measurement of vibratory signals with only accelerometers to distinguish the fault between bearings and/or unbalance using a nonlinear approach based on neural networks applied to a rotodynamic system, which will be trained for various conditions of free-fault and under-fault operation.

## Vibrations, Unbalance, Fault diagnosis, Neural networks, Rotodynamic system

### 1. Introducción

En la actualidad las tecnologías y procesos industriales han avanzado de forma exponencial y han requerido de la modernización de los procesos de fabricación industrial y de servicios, los motores eléctricos o bien todo lo que en resumen se le conoce como una maquina rotativa, son de vital importancia en los procesos debido a la utilidad que tienen en la industrial para sistemas de ingeniería (Ambur y Rinderknecht 2018; Huesca-Lazcano et al. 2019). Gran parte de las máquinas en la actualidad se desarrollan en base a sistemas mecatrónicos, esto para facilitar los procesos a los que están sometidos, sin embargo, aunque no se desea, las vibraciones se pueden encontrar en todas las máquinas rotatorias. Esto podría causar incomodidad a los usuarios, afectar el rendimiento del proceso al que está sometida y también podría provocar fallas parciales o totales (Ambur y Rinderknecht 2018).

En la maquinaria rotativa, el control sobre las fuerzas dinámicas, principales generadores de las grandes amplitudes de vibración y, el principal generador de los problemas de fatiga y desgaste ha sido la principal causa de estudios para evitar fallas catastróficas en los sistemas rotodinámicos (Sánchez-Acevedo, Nova A, y Madrigal A. 2018). Una de las fuentes más comunes de generación de vibración en máquinas rotatorias se debe al desbalance. El desbalance ocurre cuando el eje principal de inercia del rotor no coincide con el eje geométrico del sistema, lo que provoca vibraciones que generan fuerzas indeseables que se transmiten directamente a los elementos mecánicos, así como, soportes, cojinetes o baleros del rotor y ejes o acoples que el sistema posea incluyendo baleros y cojinetes. (Mendoza Larios et al. 2016), El monitoreo de la condición de la maquinaria rotativa es vital para obtener un proceso sin inconvenientes en la industria. La fabricación imprecisa como suele ocurrir por errores de procesos que se puede apreciar en los rodamientos, ejes y sin olvidar las condiciones de operación extremas, son las causas comunes de fallas en las maquinarias. Aparte de las pérdidas financieras que esto conlleva debido a los paros de procesos provocado por las averías repentinas de las maquinas pueden incluso provocar fallos catastróficos (Tahir et al. 2017).

Actualmente sean diseñado una variedad de metodologías para la de detección de fallas a partir del monitoreo de las vibraciones en los equipos, cabe destacar que esto también va a depender de varios factores a los que esté sometido el equipo a estudiar, como por ejemplo la carga de la máquina, la velocidad de operación, la cimentación, la rigidez, etc. Para esto, se emplean sensores específico, los cuales a partir de tarjetas de adquisición se obtiene datos a partir de señales a estudiar, cabe mencionar que debido al comportamiento no lineal de estos sistemas, la metodología debe trabajar bajo un esquema no lineales y a partir de ahí, se mencionan algunas de las metodologías utilizadas en la actualidad (Estupiñán P, San Martin, y Canales M 2006; Huesca-Lazcano et al. 2019; Sánchez-Acevedo et al. 2018; Tahir et al. 2017), como por ejemplo: La transformada rápida de Fourier (FFT): permite detección de cualquier cambio anormal en condiciones de trabajo normal de la máquina, pero se observa que en casos industriales complejos, es incapaz de identificar la ubicación del daño, por lo tanto se puede pensar como una herramienta para detectar fallas mediante el procesamiento de señales y no para identificar fallas específicas (Boudiaf et al. 2016). Algunos otros análisis existentes para detectar fallas se muestran a continuación:

Análisis temporal: este permite el seguimiento de cualquier cambio anormal en las condiciones de trabajo normal de la máquina. Pero, no proporciona ninguna información sobre qué componente es defectuoso. Entonces es sólo una estrategia de seguridad o monitoreo condicional (Boudiaf et al. 2016). Análisis de Cepstrum (CA): se puede utilizar para identificar y diagnosticar fallas en rodamientos. Sin embargo, sus limitaciones son que genera muchos picos grandes no deseados cerca del punto cero, lo que dificulta la interpretación de la salida (Boudiaf et al. 2016).

Análisis Envolvente (EA): se pueden utilizar para la detección y diagnóstico de fallas en el rodamiento. No obstante, las limitaciones para su uso es que requiere el conocimiento previo de la frecuencia de resonancia y la banda de filtrado, lo que nos hace referencia a que para utilizarlo se requiere de experiencia previa (Boudiaf et al. 2016).

Transformada de wavelet (WT): se puede utilizar para la detección y diagnóstico de fallas en rodamientos. Sin embargo, se requiere preselección de la *wavelet mother* adecuada y nivel de descomposición apropiado que contenga la información necesaria para el diagnóstico de fallas (Boudiaf et al. 2016).

También se presenta como alternativa la identificación o extracción de parámetros no lineales entre los cuales destaca el máximo exponente de Lyapunov, como un indicador del estado de la máquina y comparativa al someterla a diferentes escenarios de operación libre de falla y bajo fallas (Huesca-Lazcano et al. 2019).

La metodología a partir de inteligencia artificial (AI), la cual también es un dominio popular para el diagnóstico automático de fallas en las maquinarias, incluyen redes neuronales artificiales (ANN), redes bayesianas, máquina de vectores de soporte (SVM), métodos de entropía y optimización, lógica difusa (DL). En general estos métodos buscan construir un modelo de caja negra a partir de datos históricos del proceso resultando muy útil para sistemas dinámicos no lineales (Tahir et al. 2017).

En el siguiente trabajo se presenta una propuesta para la detección de fallas en un sistema rotodinámico no lineal para distinguir entre el desbalance y daños en los rodamientos a partir del análisis de las vibraciones obtenidas con acelerómetros y encoder, esto aplicando el entrenamiento de redes neuronales con el sistema en diferentes condiciones libre de falla o con fallas.

## 2. Metodología empleada en la literatura.

### 2.1. Metodología para el balanceo de rotores empleando un analizador de vibraciones

El desbalance es una medida que mide la distancia en la que se desplaza la línea central del rotor, de la línea central de rotación. La fuerza generada por el desbalance, la fuerza centrífuga, se calcula en función de la masa de desbalanceo ( $m$ ), la excentricidad ( $r$ ) y la velocidad de rotación ( $\omega$ ), según la ecuación (1). Aunque, esto es función del tipo de rotor, su dinámica puede ser mucho más compleja, y el cálculo de las aceleraciones también.

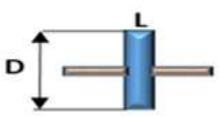
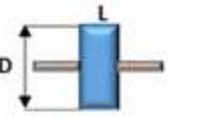
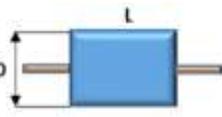
$$F_{Centrifuga} = m(r * \omega^2) \quad (1)$$

El desbalance se presenta en forma sincrónica a la velocidad de rotación del equipo, y su dirección es completamente radial. Por lo tanto, en el espectro de vibraciones, la amplitud de vibración que esta asociadas a este problema se puede observar en la componente  $1X$  (primer armónico), Para conocer los tipos de desbalance, la norma ISO 1925 muestra una clasificación, según la distribución de las masas desbalanceadoras en: desbalanceo estático; cuando el eje principal de inercia es paralelo al eje de rotación, desbalanceo por fuerzas par; cuando el eje principal de inercia intercepta al eje de rotación en el centro de gravedad del rotor, desbalanceo cuasiestático; cuando el eje principal de inercia intercepta al eje de rotación en un punto distinto al centro de gravedad del rotor, y desbalanceo dinámico; cuando el eje principal de inercia no intercepta al eje de rotación.

A partir de la geometría, la distribución de masas y la velocidad de operación del rotor, el balanceo se puede realizar corrigiendo en un plano, y en dos o más planos. Expresado en la norma ISO 5406, se obtienen los modelos para balanceo teniendo en cuenta la relación entre el largo y el diámetro del rotor. En la tabla 1, se exponen estos modelos. En la norma ISO 1940 se establecen los niveles máximos de desbalanceo permitidos para las diferentes aplicaciones industriales.

En la siguiente metodología propuesta por (Sánchez-Acevedo et al. 2018) para balance de sistemas rotodinámicos se presenta la configuración de los parámetros requeridos para la aplicación de la metodología para el balanceo y los cálculos y posiciones para la realizar la corrección de este. El analizador que emplearon es un sistema comercial OROS 35 y sus aplicaciones correspondientes. Configuración inicial: Aquí definen el número de planos que se van a balancear, y el tipo de balanceo que se aplicara tomando en consideración en esta misma sección la posición de los sensores en la configuración.

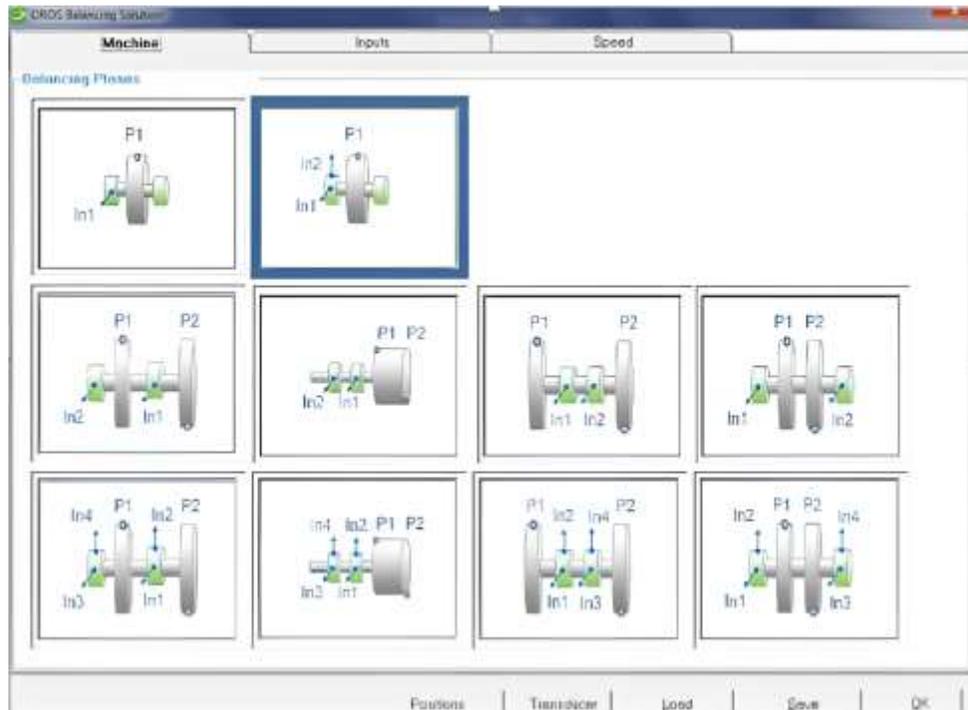
**Tabla 1 Modelos de Balanceo**

Rotor / modelo	Relación L/D	Modelo de balanceo		
		Un plano	2 planos	Múltiples planos
	Menos a 0.5	Hasta 1000 RPM	Superior a 1000 RPM	NO
	Mayor que 0.5 y menor que 2	Hasta 150 RPM	150- 2000 RPM superior al 70% Vel. Critico	Superior a 2000 RPM, superior al 70% Vel. Critica
	Mayor que 2	Hasta 100 RPM	100 RPM superior al 70% Vel. Critico	Superior a 70% Vel. Critica

Fuente: (Sánchez-Acevedo et al. 2018)

Ahora procedieron a la configuración de los sensores, a través de la información solicitada, tanto para los acelerómetros como para el tacómetro. Este proceso incluye la frecuencia de muestreo.

**Figura 2** Configuración y ubicación de planos y acelerómetros que se van a trabajar



*Fuente: (Sánchez-Acevedo et al. 2018)*

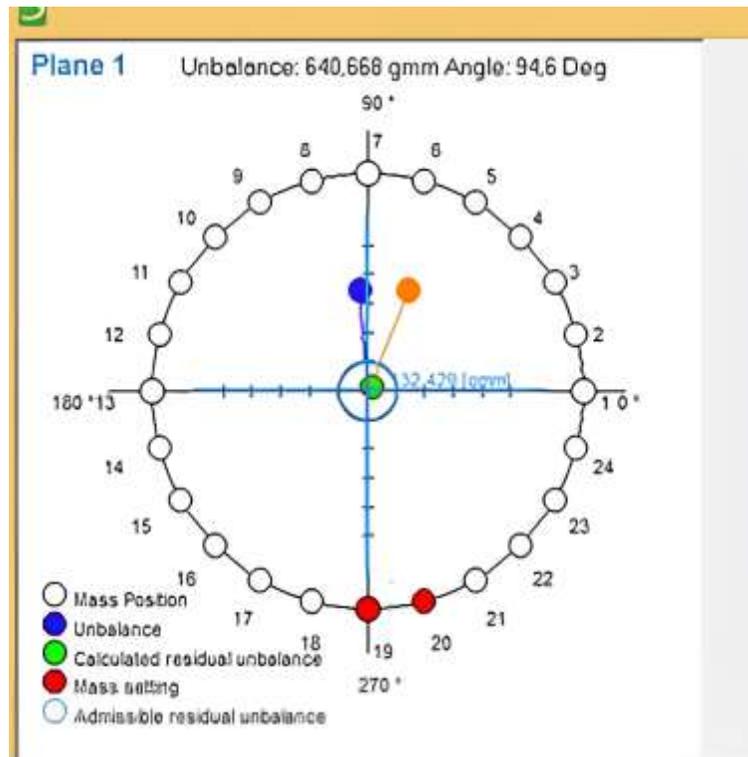
Configuración del rotor: Ingresaron la cantidad de planos, el número de posiciones de las masas, el radio desde el centro de rotación a las posiciones de las masas, la masa del rotor (esta masa debe ser dividida en el número de rodamientos del rotor), la velocidad de los rotores, la calidad del balanceo y, la metodología ya sea agregando o retirando masas de prueba, como se muestra en la ventana del sistema de adquisición OROS 35 de la figura 2.

Este proceso está dividido en 3 secciones. 1: determinaron el estado inicial del balanceo del sistema, permite conocer si se necesita el balanceo; 2: introdujeron de manera controlada las masas de desbalanceo, esto con el fin de determinar la masa de desbalanceo, así como su posición; 3: agregaron o quitaron masas para balancear, según sea necesario, y con estos 3 pasos, determinaron si cumple con los niveles permitidos de desbalanceo, o si se hace necesario balancear de nuevo.

El objetivo de la prueba es disminuir el nivel de excentricidad de desbalanceo, señalado con las líneas azules de la figura 2. El círculo azul representa el desbalanceo admisible. Ahora, la línea de excentricidad después del proceso de balanceo debería quedar dentro del límite de la línea azul. La ventana mostrada en la figura 2 es una herramienta que permite al usuario conocer el resultado del proceso.

Por último, la validación se realiza con el análisis de vibraciones, en el que se debe evidenciar la disminución de las vibraciones, en el espectro en frecuencias, del primer armónico ( $1X$ ), y el cumplimiento de la norma.

**Figura 2** Representación gráfica de la ejecución del balanceo



Fuente: (Sánchez-Acevedo et al. 2018)

Para validar la metodología, los autores emplearon el sistema de adquisición OROS 35 con diferentes casos estudiados en diferentes bancos de ensayos de vibraciones mecánicas. De igual forma, los autores realizaron la validación de la metodología y las herramientas para balanceo en maquinaria tipo industrial. En los análisis realizados establecen la condición de operación tanto para el sistema desbalanceado, es decir, antes de aplicar el proceso de balanceo, como para el instante posterior al proceso, con el objeto de evaluar su efectividad. (Sánchez-Acevedo et al. 2018)

## 2.2 Balanceo Automático de un Sistema Rotor-Cojinete: Identificador Algebraico en Línea del Desbalance Para un Sistema Rotodinámico

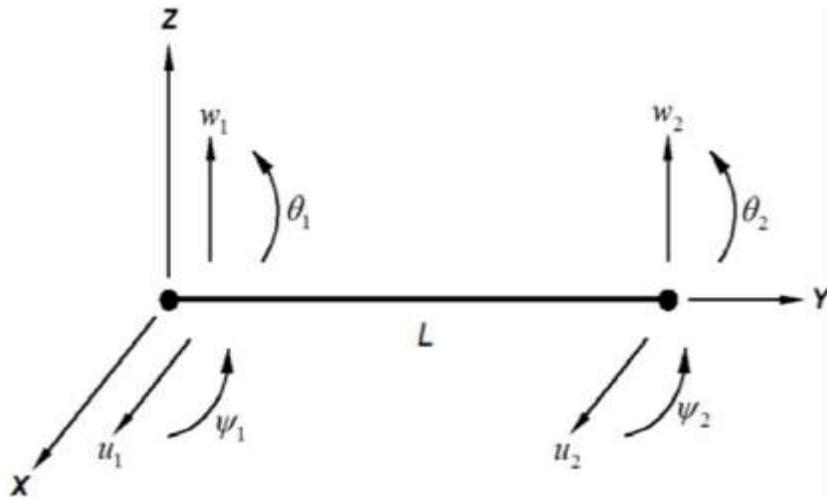
El modelado de un sistema rotodinámico con variados grados de libertad lo obtenemos a partir del teorema de elemento finito, propuesto en (Mendoza Larios et al. 2016). La flecha este modelado a partir de un análisis de tipo viga considerando el grado de libertad de esta, Así como se ilustra en la Figura 3. para esto, el desplazamiento nodal vectorial se define a continuación:

$$\{\delta\} = \{u_1, w_1, \psi_1, \theta_1, u_2, w_2, \psi_2, \theta_2\}^T \quad (2)$$

En la ecuación (2),  $T$  es la transpuesta de  $\{\delta\}$  y define el vector de desplazamientos nodal y los desplazamientos y rotaciones correspondientes a los movimientos en las direcciones x-y-z son:

$$\{\delta_u\} = \{u_1, \psi_1, u_2, \psi_2\}^T \quad \{\delta_w\} = \{w_1, \theta_1, w_2, \theta_2\}^T \quad (3)$$

**Figura 3** Elemento finito tipo viga para el modelado del eje



Fuente: (Mendoza Larios et al. 2016)

Ahora, el modelado del sistema rotodinámico con diferentes grados de libertad , diferentes masas de desbalance y varios tipos de platos para desbalance esto lo definimos con la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}
 [M]\{\delta''\} + [[C_1] + \phi'[C_2]]\{\delta'\} + [[K] + \phi''[K_1]]\{\delta\} = \\
 \phi'^2 \sum_{n=1}^{nm_u} \{F_{u(2n-1)}(\phi)\} + \phi'' \sum_{n=1}^{nm_u} \{F_{u(2n)}(\phi)\} \\
 + \phi'^2 \sum_{n=1}^{nm_b} \{F_{b(2n-1)}(\phi)\} + \phi'' \sum_{n=1}^{nm_b} \{F_{b(2n)}(\phi)\}
 \end{aligned} \quad (4)$$

con:

$$\begin{aligned}
 F_{u(2n-1)} &= m_u d_n (\sin(\phi + \alpha_n) + \cos(\phi + \alpha_n)) \\
 F_{u(2n)} &= m_u d_n (\sin(\phi + \alpha_n) - \cos(\phi + \alpha_n)) \\
 F_{b(2n-1)} &= m_b e_n (\sin(\phi + \varepsilon_n) + \cos(\phi + \varepsilon_n)) \\
 F_{b(2n)} &= m_b e_n (\sin(\phi + \varepsilon_n) - \cos(\phi + \varepsilon_n))
 \end{aligned}$$

donde:

$nm_u$	Es el número de masas para desbalancear el sistema.
$nm_b$	Es el número de masas para de balancear, atribuidas a los platos para balanceo activo.
$\varepsilon_n$ y $\alpha_n$	Es las posiciones angulares de las masas para balance y desbalance, respectivamente.
$\{\delta\}$	Es el vector total que contiene los desplazamientos nodales.
$[M]$	Es la matriz general de masa del sistema.
$[[C_1] + \phi'[C_2]]$	Es la matriz general de amortiguamiento, que incluye los efectos giroscópicos en función de la velocidad de rotación ( $\phi'[C_2]$ ) y $[C_1]$ que contiene el amortiguamiento atribuible a los soportes.
$[K] + \phi''[K_1]$	Es la matriz general de rigidez, y está formada por $[K]$ que incluye la rigidez del rotor y soportes.
$\phi''[K_1]$	Es una expresión de rigidez que está en función de la aceleración angular del rotor.
$\{F_{u(2n-1)}\}$ y $\{F_{u(2n)}\}$	Son los vectores de fuerza atribuidos a las masas en desbalance.
$m_u d_n$ y $\{F_{b(2n-1)}\}, \{F_{b(2n)}\}$	Son los vectores de fuerza atribuidos a las masas de balance y localizadas en los platos activos de balanceo ( $m_b e_n$ ).
$\phi, \phi'$ y $\phi''$	Son el desplazamiento, la velocidad y la aceleración angular del rotor, respectivamente.

### Rampa de excitación de tipo lineal

La rampa de excitación visualiza un incremento de la frecuencia de excitación, con una pendiente específica con respecto al tiempo y puede ser en creciente o decreciente. En general, la frecuencia de excitación en los sistemas rotodinámicos tiene pendientes no lineales en el tiempo. Pero para algunos casos, esta variación suele ser muy lenta, con esto podemos aplicar procesos de linealización para estudiar su comportamiento. Entonces a la ecuación (4) se le puede considerar una variación de frecuencia de excitación es la siguiente ecuación:

$$\phi'(t) = \phi_0 + \phi''t \quad (5)$$

donde:

$\phi_0$  = es la frecuencia de excitación justo al inicio de la rampa.  
 $\phi''$  = es la tasa de cambio de la frecuencia de excitación en función del tiempo.  
 $t$  = es la variable del tiempo.

### Modelo matemático para la identificación algebraica en línea del desbalance y posición angular

La identificación algebraica de los parámetros se basa en el modelo matemático del sistema rotodinámico de varios grados de libertad, donde el vector de desplazamientos de nuestro sistema está representado por  $\{\delta\}$ . Los datos de entrada para la identificación son los desplazamientos  $u_1, w_1, u_2, w_2$  esto corresponden a el movimiento en x-y-z, tomando en cuenta que esto es solo para una aplicación teórica, para el sistema rotodinámico en tiempo real, el vector  $\{\delta\}$ , corresponderá a la señal obtenida con sensores de movimiento, ubicados en cada rodamiento del sistema rotodinámico considerando los grados de libertad. Para estudiar el sistema rotodinámico, tomaremos en cuenta la masa con desbalance y un plato para balanceo. Entonces la ecuación (4) quedara de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} [M]\{\delta''\} + [[C_1] + \phi'[C_2]]\{\delta'\} + [[K] + \phi''[K_1]]\{\delta\} = \\ \{m_u d_n (\sin(\phi + \alpha_n) + \cos(\phi + \alpha_n))\} \\ + \{m_u d_n (\sin(\phi + \alpha_n) + \cos(\phi + \alpha_n))\} \\ \{m_u e_n (\sin(\phi + \varepsilon_n) + \cos(\phi + \varepsilon_n))\} \\ + \{m_u e_n (\sin(\phi + \varepsilon_n) - \cos(\phi + \varepsilon_n))\} \end{aligned} \quad (6)$$

donde  $\varepsilon$  y  $\alpha$  representan las posiciones angulares de las masas de balanceo y desbalance. Ahora, multiplicaremos la ecuación (6) por  $t^2$  e integramos dos veces en función de  $t$ , se obtiene la ecuación (7) para identificar algebraicamente el desbalance y su posición angular del sistema rotodinámico recordando los grados de libertad que posee:

$$\begin{aligned} \iint [[M]\{\delta''\} + [[C_1] + \phi'[C_2]]\{\delta'\} + [[K] + \phi''[K_1]]\{\delta\}]t^2 = \\ \{\iint m_u d_n (\phi'^2 \sin(\phi + \alpha_n) + \phi'' \cos(\phi + \alpha_n))t^2\} \\ + \{\iint m_u d_n (\phi'' \sin(\phi + \alpha_n) + \phi'^2 \cos(\phi + \alpha_n))t^2\} \\ \{\iint m_u e_n (\phi'^2 \sin(\phi + \varepsilon_n) + \phi'' \cos(\phi + \varepsilon_n))t^2\} \\ + \{\iint m_u e_n (\phi'' \sin(\phi + \varepsilon_n) - \phi'^2 \cos(\phi + \varepsilon_n))t^2\} \end{aligned} \quad (7)$$

donde

$\iint \varphi(t)$  son integrales múltiples en el tiempo (t) de la forma:

$$\int_0^t \int_0^{\sigma_1} \dots \int_0^{\sigma_{N-1}} \varphi(\sigma_N) d\sigma_N \dots d\sigma_1, \text{ con } \int \varphi(t) = \int_0^t \varphi(\sigma) d\sigma \text{ y } N \text{ un entero positivo}$$

Integramos por partes y manipulamos de manera algebraica en la ecuación (7), y se obtiene un sistema de ecuaciones lineales para cada soporte como se aprecia a continuación:

$$A(t)\theta = b(t) \quad (8)$$

donde,  $\theta = [m_u d_\eta = m_u d \cos(\alpha), m_u d_\zeta = m_u d \sin(\alpha)]^T$  representa el desbalance vectorial por identificar, entonces  $A(t)$  y  $b(t)$  se pueden representar de la siguiente manera:

$$A(t) = \begin{bmatrix} -a_{11}(t) & a_{12}(t) \\ a_{12}(t) & a_{11}(t) \end{bmatrix}, \quad b(t) = \begin{Bmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \end{Bmatrix} \quad (9)$$

con

$$a_{11} = \int t^2 \phi' \cos \phi - 2 \iint t \phi' \cos \phi$$

$$a_{12} = \int t^2 \phi' \sin \phi - 2 \iint t \phi' \sin \phi$$

$$b(t) = [M]t^2\{\delta\} + \iint [[C_1]t^2 + \phi'[C_2]t^2 - 4[M]t\{\delta\} + \iint [2[M] - 2[C_1]t - [C_2](\phi''t^2 + 2\phi't)]\{\delta\} + \iint [[K_1] + \phi''[K_2]t^2]\{\delta\} + \{m_b e \int t^2 \phi' \cos(\phi + \varepsilon)\} - \{2m_b e \iint t \phi' \cos(\phi + \varepsilon)\} - \{m_b e \int t^2 \phi' \sin(\phi + \varepsilon)\} + \{2m_b e \iint t \phi' \sin(\phi + \varepsilon)\}]$$

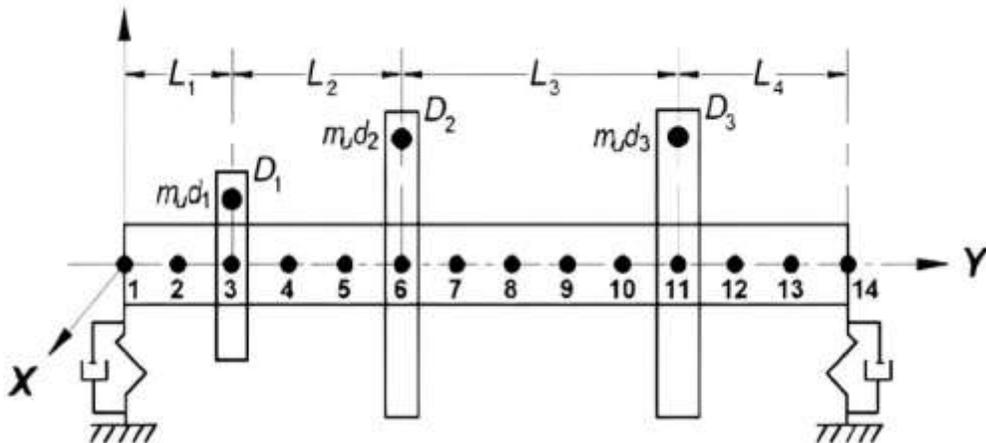
Ahora, observaremos  $A(t)$  y  $b(t)$  las cuales están en función de las vibraciones del rotor  $\{\delta\}$  y responden solamente a los grados de libertad de sistema. En la ecuación (8) se puede ver que el vector  $\theta$  es identificable algebraicamente sí, y solo sí, el comportamiento dinámico del sistema obedece a la condición  $\det[A(t) \neq 0]$ . Podemos decir que, esta condición se obtiene en intervalos pequeños  $(t_0, t_0 + K]$  donde  $K$  es un valor positivo y necesariamente pequeño. Ahora de la ecuación (8) se obtiene la identificación de los parámetros del modelo de la ecuación (4) para el desbalance y su posición angular, esto visualizado en la ecuación siguiente:

$$\left. \begin{aligned} m_u d_\eta &= \frac{b_2 a_{11} - b_1 a_{12}}{a_{11}^2 + a_{12}^2} \\ m_u d_\zeta &= \frac{b_1 a_{12} - b_2 a_{11}}{a_{11}^2 + a_{12}^2} \\ m_u d_e &= \sqrt{m_u d_\eta^2 + m_u d_\zeta^2} \\ \alpha_e &= \cos^{-1} \left( \frac{m_u d_\eta}{m_u d_e} \right) \end{aligned} \right\} \forall t \in (t_0, t_0 + K] \quad (10)$$

En la ecuación (10) podemos observar que la identificación algebraica de los parámetros del desbalance y la posición angular es independiente de la condición inicial del sistema y depende del vector de desplazamiento en las direcciones x-y-z en el instante de tiempo  $t$ , así como de la pendiente de la rampa de excitación. (Mendoza Larios et al. 2016).

De manera gráfica, en la figura 4 se muestra un ejemplo del modelo del rotor en donde se muestran tres platos inerciales con dos soportes en los extremos. De manera general, se da como ejemplo tres masas diferentes para desbalance con tres posiciones angulares (3, 6 y 11) diferentes y distribuidas en los tres platos.

**Figura 4** Modelo aproximado del rotor



Fuente: (Mendoza Larios et al. 2016)

Es importante destacar que el modelo del rotor de la figura 4 corresponde al modelo de la ecuación (4) con algunas restricciones que se tomaron en cuenta a la hora de simplificar.

### **3. Metodología para desarrollar**

#### **3.1 Concepto básico redes neuronales**

Las redes neuronales son más que otra forma de emular ciertas características propias de los humanos, como la capacidad de memorizar y de asociar hechos. Si se examinan con atención aquellos problemas que no pueden expresarse a través de un algoritmo, se observará que todos ellos tienen una característica en común; la experiencia. El hombre es capaz de resolver estas situaciones acudiendo a la experiencia acumulada. Así, parece claro que una forma de aproximarse al problema consista en la construcción de sistemas que sean capaces de reproducir esta característica humana. En definitiva, las redes neuronales no son más que un modelo artificial y simplificado del cerebro humano, que es el ejemplo más perfecto del que disponemos para un sistema que es capaz de adquirir conocimiento a través de la experiencia. Una red neuronal es un nuevo sistema para el tratamiento de la información, cuya unidad básica de procesamiento está inspirada en la célula fundamental del sistema nervioso humano que es la neurona. (Damián Jorge, 2001)

### **4. Discusión de Metodologías desarrolladas**

El primer esquema expuesto en la sección 2.1.1 se utiliza un equipo especialmente diseñado para detección de desbalanceo de excentricidad en los ejes rotodinámicos de los equipos, con este sistema se detecta el desbalance a partir de sensores de vibración colocados en los soportes de los rodamientos y un medidor de revoluciones, con ellos se estudia la amplitud de dichas vibraciones en diferentes escenarios, y se logra balancear el sistema compensado en donde requiere peso para reducir la excentricidad, con esto llegamos a la conclusión que este método solo funciona para reducir desbalance en los ejes rotodinámicos, por lo tanto no podremos obtener información suficiente si se requiere el estudio de fallas por rodamientos.

El segundo esquema expuesto en la sección 2.2.2 se presenta un modelado matemático linealizado para obtener el desbalance y posición angular de un eje con múltiples grados de libertad, la metodología presentada se basa en un modelo algebraico complejo modelado en software de ingeniería con el fin de lograr el objetivo: determinar excentricidad y la posición angular de dicha excentricidad, con esto se entiende que esta metodología es precisa al determinar en donde se encuentra el desbalance y es más específico que el anterior pero solo está diseñado para detectar excentricidad, por lo tanto de igual forma, no se podría determinar si la excentricidad es causada por daños de rodamientos o alguna otra condición del sistema, también se puede mencionar que al ser un modelado matemático se requiere de experiencia en la rama para lograr aplicar esta metodología ya que el algoritmo para identificación de parámetros depende en gran medida de las consideraciones de la rampa de excitación lineal. Luego entonces la identificación es conveniente para variaciones lentas ya que el sistema rotodinámico es un sistema no lineal.

#### **4.1. Propuesta**

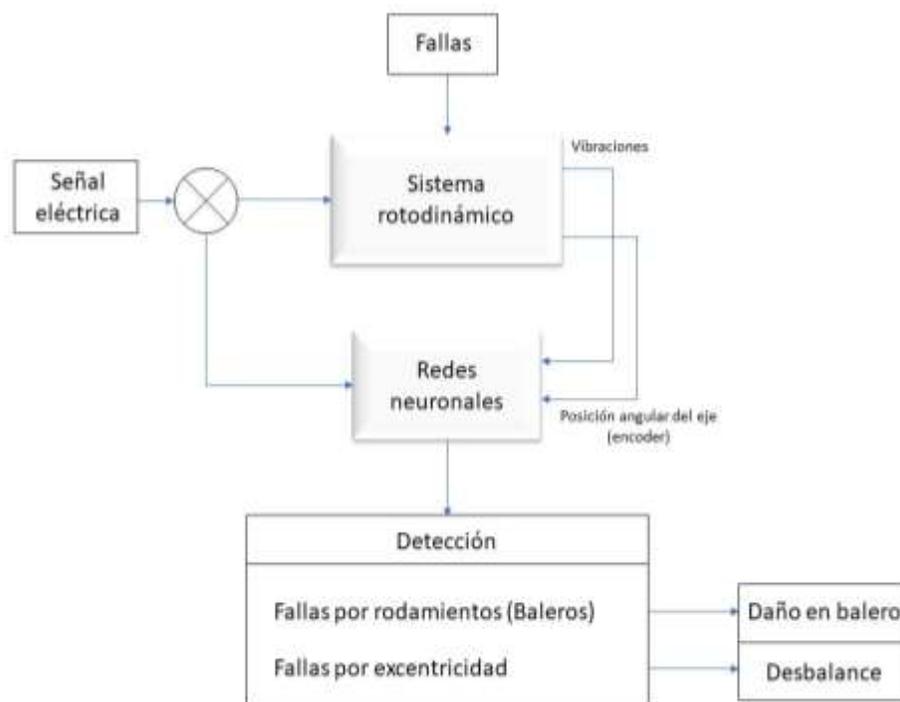
En este artículo, la propuesta es utilizar inteligencia artificial para detectar fallas en un sistema rotodinámico, todos los sistemas que poseen ejes o acoples, tienden a sufrir desbalance por excentricidad. La excentricidad del estator y el rotor es una de las fallas básicas en los motores de inducción y ejes rotodinámico que contribuyen a un porcentaje considerable de las fallas del motor. Algunas razones para la excentricidad incluyen: sección transversal interna del estator elíptica, desalineación relativa del rotor y el estator en la etapa de fijación y puesta en marcha, colocación incorrecta del rodamiento de bolas, fricción del rodamiento de bolas, desalineación del eje de carga y el eje del rotor, resonancia mecánica en velocidad crítica, carga desequilibrada e inclinación del eje del rotor. (Faiz y Ojaghi 2009)

La propuesta de este trabajo, orientado al sistema rotodinámico, es construir un sistema que sea capaz, a partir de señales estudiadas, de distinguir entre fallas por excentricidad o en su defecto por rodamientos en mal estado ya sea en el eje rotodinámico o en el eje del motor y sus rodamientos o cojinetes.

La propuesta se basa en entrenar una red neuronal a partir de los datos de entrada y salida del sistema rotodinámico trabajando en condición libre y bajo falla, para ello se considerarán las fallas en baleros y fallas por desbalance. Para ello se propone utilizar un banco de pruebas que permita emular fallas en los baleros de cada soporte y desbalance mediante la adición de masas en los platos de desbalance activo.

Para esta metodología se propone el siguiente esquema, donde se explica a grandes rasgos la hipótesis propuesta

**Figura 5** Esquema propuesto de entrenamiento para detección de fallas



*Fuente: Elaboración Propia*

En la figura 5 se muestra el esquema de la propuesta para este artículo donde se describe de manera gráfica los pasos aplicar.

Para entrenar la red neuronal, se propone desarrollar una configuración experimental que permita recolectar un gran número de datos del sistema rotodinámico, para ellos se consideran diferentes escenarios de prueba que permita trabajar al sistema libre de falla y bajo falla. Los escenarios o pruebas de entrenamiento serán los siguientes:

- Libre de fallas: para este escenario el sistema rotodinámico estará en óptimas condiciones de operación es decir sin ningún tipo de falla ya sea por excentricidad o daño en rodamientos
- Falla de baleros posición 1: para este escenario se le inducirá una falla al sistema colocando un balero dañado en una posición aleatoria en algunas de los soportes del eje suponiendo que se tiene dos soportes la posición asignada sería la que se encuentra cerca del motor eléctrico.
- Falla de balero posición 2: en este escenario se repite la prueba del inciso b) cambiando la posición al siguiente soporte
- Falla por excentricidad: para esta falla en el sistema existe un plato perfectamente balanceado con orificios donde se puede aplicar pesos para simular excentricidad.

El objetivo de los diversos escenarios es entrenar la red neuronal de tal modo que sea capaz de distinguir que tipo de falla presenta el sistema ya sea por desbalance o por baleros dañados. el análisis temporal y frecuencial de las señales de entrada y salida del sistema rotodinámico serán utilizado a priori para el entrenamiento más preciso de la RN

## Resultados esperados

Los resultados que se esperan de esta propuesta son obtener con mayor precisión una detección de fallas de un sistema rotodinámico con ello facilitar al operador el trabajo de localizar la falla con un diagnóstico más exacto sobre la falla ya sea por desbalance o por algún rodamiento que este presentando desgaste por envejecimientos.

La mayoría de los métodos existentes tiende a ser complejos y en ocasiones difíciles de entender o aplicar, el uso de la red neuronal nos permite lograr de manera más sencilla la detección evitando los cálculos matemáticos necesarios para los otros métodos, en este caso, solo se requieren datos obtenidos de la planta o sistema, con lo que se pueden proponer aún más escenarios para lograr una mayor precisión a la hora de crear un informe que nos indique que falla esta presentado el equipo al cual se le aplicara la propuesta.

## Agradecimiento

A la Universidad Autónoma del Carmen, por permitir realizar los estudios de maestría en ingeniería mecatrónica

## Financiamiento

Financiación: El presente trabajo ha sido financiado por CONACYT [CVU: 1143096, 2021];

## Conclusiones

Existen una variedad de metodologías para aplicar para detección de fallas desde aplicaciones prácticas con equipos diseñados específicamente para tal fin o bien aplicando modelados matemáticos que nos permitan obtener un detección precisa, observamos en este artículo que todos son útiles, pero cada uno tiene su desventaja a la hora de ser aplicado, desde no lograr detectar cual es la falla, hasta la complejidad de la aplicación, en este trabajo se propuso un método que nos permitirá ahorrar tiempo y esfuerzo a la hora de lograr detectar fallas, que a su vez tendrá un rango de precisión mayor para predecir en donde se encuentra la falla y que tipo es, se estudiara un sistema para lograr corroborar lo descrito aquí, y así poder obtener los resultados esperados, de esta aplicación.

## Referencias

- Ambur, Ramakrishnan, y Stephan Rinderknecht. 2018. "Unbalance Detection in Rotor Systems with Active Bearings Using Self-Sensing Piezoelectric Actuators". *Mechanical Systems and Signal Processing* 102. doi: 10.1016/j.ymsp.2017.09.006, <https://doi.org/10.1016/j.ymsp.2017.09.006>
- Boudiaf, Adel, Abdelkrim Moussaoui, Amine Dahane, y Issam Atoui. 2016. "A Comparative Study of Various Methods of Bearing Faults Diagnosis Using the Case Western Reserve University Data". *Journal of Failure Analysis and Prevention* 16(2). doi: 10.1007/s11668-016-0080-7, <https://doi.org/10.1007/s11668-016-0080-7>
- Estupiñán P, Edgar, César San Martín, y Luis Canales M. 2006. "DESARROLLO DE UN INSTRUMENTO VIRTUAL PARA EL BALANCEAMIENTO DINAMICO DE ROTORES". *Ingeniare. Revista Chilena de Ingeniería* 14(2). doi: 10.4067/s0718-33052006000100008, <https://doi.org/10.4067/s0718-33052006000100008>
- Faiz, Jawad, y Mansour Ojaghi. 2009. "Different Indexes for Eccentricity Faults Diagnosis in Three-Phase Squirrel-Cage Induction Motors: A Review". *Mechatronics* 19(1), <https://doi.org/10.1016/j.mechatronics.2008.07.004>
- Huesca-Lazcano, Erick Eduardo, Oscar Flores-Ramírez, Gabriel Romero-Rodríguez, y Karla Cecilia Apan-Araujo. 2019. "Detección de Fallas En Máquinas Rotatorias Utilizando Parámetros No Lineales". *Revista de Ingeniería Mecánica*. doi: 10.35429/jme.2019.12.3.25.33, <https://doi.org/10.35429/jme.2019.12.3.25.33>

Damián Jorge, M. (2001). *Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones*. Historia, 55. <ftp://decsai.ugr.es/pub/usuarios/castro/Material-Redes-Neuronales/Libros/matich-redesneuronales.pdf>

Mendoza Larios, J. G., J. Colín Ocampo, A. Blanco Ortega, A. Abúndez Pliego, y E. S. Gutiérrez Wing. 2016. “Balanceo Automático de Un Sistema Rotor-Cojinete: Identificador Algebraico En Línea Del Desbalance Para Un Sistema Rotodinámico”. *RIAI - Revista Iberoamericana de Automatica e Informatica Industrial* 13(3). doi: 10.1016/j.riai.2016.03.004, <https://doi.org/10.1016/j.riai.2016.03.004>

Sánchez-Acevedo, Heller, Fabian R. Nova A, y Jhon A. Madrigal A. 2018. “Metodología Para El Balanceo de Rotores Empleando Un Analizador de Vibraciones”. *Revista UIS Ingenierías* 17(2):291–308. doi: 10.18273/revuin.v17n2-2018025, <https://doi.org/10.18273/revuin.v17n2-2018025>

Tahir, M. Masood, Ayyaz Hussain, Saeed Badshah, Abdul Qayyum Khan, y Naeem Iqbal. 2017. “Classification of Unbalance and Misalignment Faults in Rotor Using Multi-Axis Time Domain Features”. en *ICET 2016 - 2016 International Conference on Emerging Technologies*, <https://doi.org/10.1109/ICET.2016.7813273>

## Capítulo 6 Caracterización fitoquímica y espectroscópica de extractos de las hojas de la *Coccoloba uvifera*

### Chapter 6 Phytochemical and spectroscopic characterization of extracts from *Coccoloba uvifera* leaves

HUCHIN-CHAN, Nancy del Carmen†, FIGUEROA-RAMÍREZ, Sandra Jazmín\*, PORCAYO-CALDERÓN, Jesús y SIERRA-GRAJEDA, Juan Manuel Tadeo

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

*Universidad de Sonora, División de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Metalurgia, Edificio 5B, Del Conocimiento Centro, C.P. 83000, Hermosillo Sonora, México.*

ID 1<sup>er</sup> Autor: *Nancy del Carmen, Huchin-Chan* / **ORC ID:** 0000-0003-1405-4563, **CVU CONACYT ID:** 785518

ID 1<sup>er</sup> Coautor: *Sandra Jazmín, Figueroa-Ramírez* / **ORC ID:** 0000-0003-1368-1741, **CVU CONACYT ID:** 164797

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *Jesús, Porcayo-Calderón* / **ORC ID:** 0000-0002-6943-3926, **CVU CONACYT ID:** 6173

ID 3<sup>er</sup> Coautor: *Juan Manuel Tadeo, Sierra-Grajeda* / **ORC ID:** 0000-0002-0565-6450, **CVU CONACYT ID:** 219284

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.49.58

N. Huchin, S. Figueroa, J. Porcayo y J. Sierra

\*sfigueroa@pampano.unacar.mx

O. Benavides & A. Flores (VV. AA.). Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente. Handbooks- TII- ©ECORFAN-Mexico, 2022.

## Resumen

En la presente investigación se obtienen extractos de las hojas de la planta *Coccoloba uvifera* y se caracterizan mediante pruebas fitoquímica y espectroscópica. Los extractos se obtuvieron mediante el proceso de maceración empleando como solventes el acetato de etilo, acetona, etanol, metanol y hexano. Asimismo, se caracterizaron con pruebas fitoquímicas (reacción con cloruro férrico 10%, reacción con grenetina, reacción hidróxido de sodio 10%, reacción Shinoda, prueba de estabilidad) y espectroscopia UV-Vis y Espectroscopía Infrarroja por Transformadas de Fourier (FTIR). Las pruebas fitoquímicas indicaron la presencia de diferentes compuestos orgánicos como antocianinas, chalconas, flavonas, flavonoles, xantonas, saponina y taninos. Los extractos obtenidos con acetato de etilo y acetona no mostraron la presencia de flavonas, flavonoles o ácido cafeico. Con espectroscópica UV-VIS se mostró la presencia de compuestos fenólicos y con la técnica de FTIR se observaron bandas de absorción características de compuestos fenólicos, alcoholes, aminas, ácidos carboxílicos, flavonoides y antocianinas.

## Coccoloba Uvifera, Inhibidor, Extractos, Maceración, Fenólicos

### Abstract

In the present investigation, extracts are obtained from the leaves of the *Coccoloba uvifera* plant and are characterized by phytochemical and spectroscopic tests. The extracts were obtained through the maceration process using ethyl acetate, acetone, ethanol, methanol, and hexane as solvents. Likewise, they were characterized with phytochemical tests (reaction with ferric chloride 10%, gelatin, sodium hydroxide reaction 10%, Shinoda reaction, stability test) and UV-Vis spectroscopy and Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR). Phytochemical tests indicated the presence of different organic compounds such as anthocyanins, chalcones, flavones, flavonols, xanthonas, saponins, and tannins. The extracts obtained with ethyl acetate and acetone did not show the presence of flavones, flavonols, or caffeic acid. UV-VIS spectroscopy observed the presence of phenolic compounds and FTIR technique characteristic absorption bands of phenolic compounds, alcohols, amines, carboxylic acids, flavonoids and anthocyanins.

## Coccoloba Uvifera, Inhibitor, Extracts, Maceration, Phenolics

### 1 Introducción

Desde la antigüedad el uso de las propiedades terapéuticas de las plantas medicinales se ha implementado para tratamiento de curación de diversas enfermedades, dolencias y para la fabricación de productos sintéticos (Ginarte, 2016). El uso de especies medicinales en los últimos años en diversos países es reconocido como la medicina natural (Mtairag, 2022); debido a que presenta eficiencia, aceptación y mantiene un bajo costo. De acuerdo con la Organización Mundial de la Salud (OMS), existen 21,000 especies de plantas que poseen potencial para ser empleadas como medicinales (Ettiyappan., 2022).

Las plantas están conformadas por diversos compuestos químicos bioactivos, que son denominados fitoquímicos: flavonoide, alcaloides, terpenos, esteroides vegetales, saponinas, curcuminas, fenólicos, glucósidos y taninoso (Chen., 2014). Este tipo de moléculas son las encargadas de producir la materia prima para la base de medicamentos y alimentos funcionales (Kuca, 2022); la capacidad de identificar y extraer los compuestos orgánicos activos es fundamental para evaluar y entender el valor potencial. Los componentes fitoquímicos incorporan y poseen propiedades antimicrobianas, antiinflamatorias, antioxidantes, compuestos fenólicos y flavonoides (Ettiyappan., 2022).

Es importante resaltar que las plantas contienen una gran variedad de compuestos orgánicos que han permitido utilizarlas ampliamente en el área medicinal. Por tal motivo, los científicos están explorando sus propiedades para utilizarlas como inhibidores verdes de corrosión (Adebayo, 2021). La función principal de estos inhibidores es retardar la velocidad de corrosión sobre los metales que son expuestos en medios corrosivos. En la región sureste de México se cuenta con una gran diversidad de flora, particularmente, la planta *Coccoloba uvifera* conocida como uva de mar se ha utilizado como planta ornamental y el tronco se ha usado como combustible, además está disponible todo el año y es de fácil acceso.

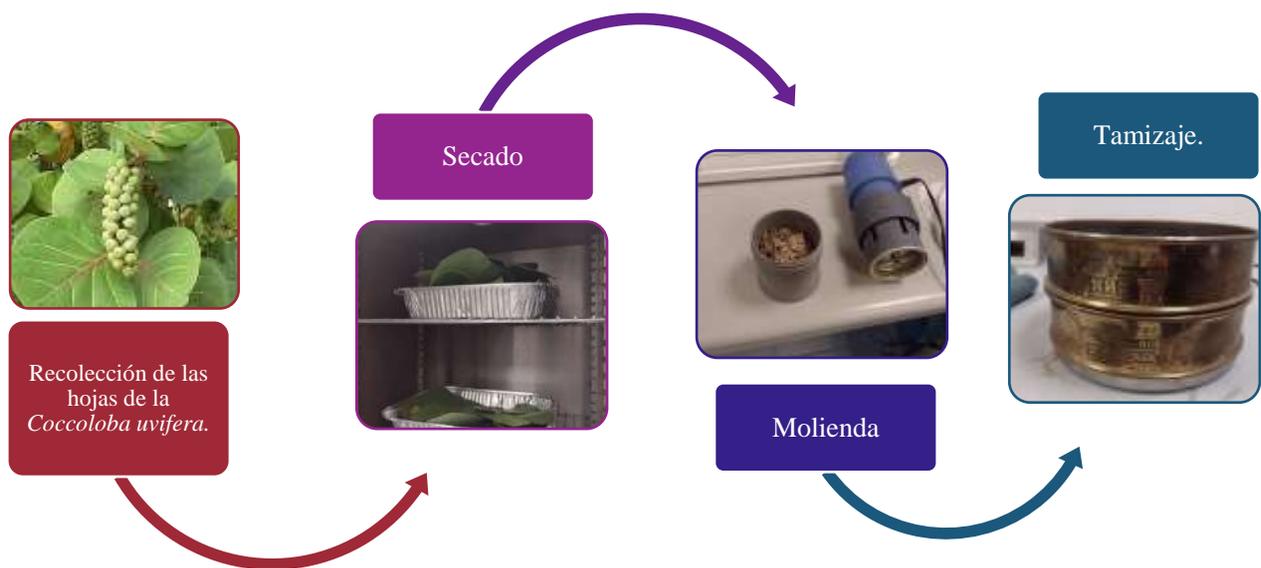
Por esta razón, en el presente trabajo se estudia las hojas de la planta de *Coccoloba uvifera* para la obtención de sus compuestos orgánicos utilizando diferentes solventes para su extracción. Asimismo, los diversos extractos obtenidos de las hojas *Coccoloba uvifera* se caracterizan mediante técnicas fitoquímica y espectroscópicas UV-VIS y FTIR.

## 2 Metodología a desarrollar

### 2.1 Recolección y obtención de los extractos

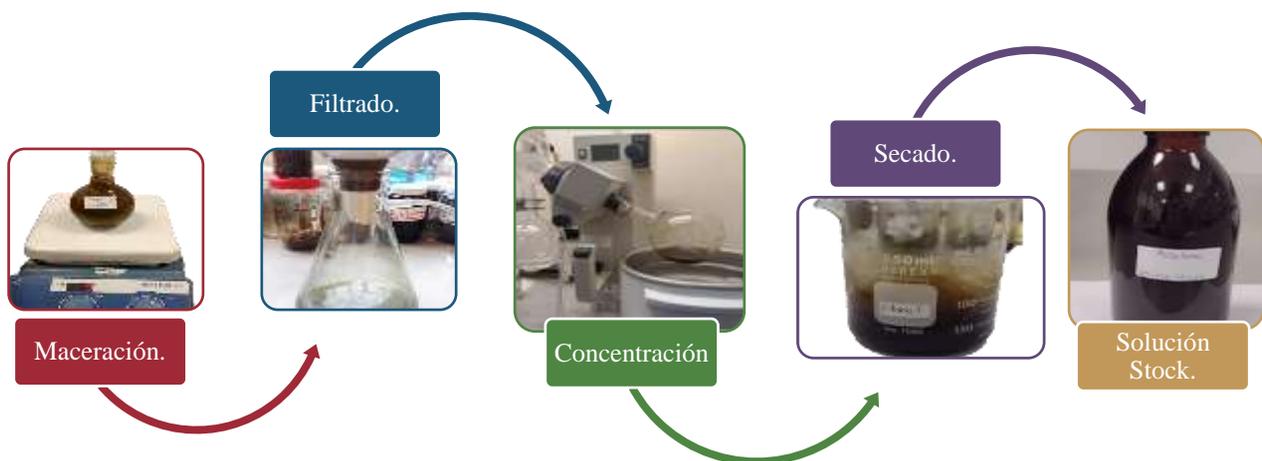
Las hojas de planta *Coccoloba Uvifera* se recolectaron en Playa Norte, Ciudad del Carmen, Campeche, las cuales se lavan con agua potable, agua destilada y se dejan escurrir por una hora. Enseguida, se cortan en pedazos pequeños y se secan en el horno a 70 °C durante 4 días; posteriormente se trituran en un molino y tamizan con la malla No. 60 (250 µm). Los extractos se obtuvieron por el método de maceración, se utiliza 25 g de polvo de la hoja en 250 mL de cada uno de los solventes, se deja en agitación por 72 horas. Los solventes empleados fueron: acetato de etilo, hexano, metanol y etanol. Los extractos se concentran en el rotavapor a 40 rpm y 60 °C, durante 25 minutos. La muestra concentrada se seca en el horno a °C por 3 días. Finalmente, se pesa el extracto seco y se prepara la solución stock con 10 mL del solvente en 250 mL de agua destilada. En la figura 1.1 se describe el proceso para la obtención del polvo de las hojas y en la figura 1.2 se muestra el esquema general del proceso de obtención de los extractos de las hojas.

**Figura 1.1.** Proceso para la obtención del polvo de las hojas de la *Coccoloba Uvifera*



Fuente de Consulta: Elaboración Propia

**Figura 1.2.** Proceso de obtención del extracto de las hojas de la *Coccoloba Uvifera*



Fuente de Consulta: Elaboración Propia

## 2.2 Caracterización fitoquímica de los extractos

Para la caracterización fitoquímica permite conocer de forma cualitativa la presencia de los compuestos orgánicos presentes en los extractos, a continuación, se describen las diferentes pruebas utilizadas:

- **Reacción de Shibita's** (Auwal MS, 2014): A 1 ml de la solución acuosa, se adicionan 0.5 mL HCl concentrado al primer tubo de ensaye, luego se coloca una tira de magnesio de 3 mm, por 5 minutos a 25 C° al agregar la tira de magnesio la muestra comenzará a espumar y para demostrar la presencia de flavonas se agrega HCl a la muestra. La solución de color rojo indica la presencia de flavonoles y naranja de flavonas.
- **Reacción de hidróxido de sodio al 10%:** Se adiciona 0.5 mL gotas de hidróxido de sodio a 1 mL de la solución, se observan cambios en la coloración donde se establece un testigo respecto al de muestra inicial. Las condiciones de reacción fueron las mismas que en la reacción anterior.
- **Identificación de Saponinas** (Auwal MS, 2014): A 3 mL de la solución acuosa del extracto se mezclaron con 10 mL de agua destilada en un tubo de ensayo. El tubo de ensayo se tapó y se agitó vigorosamente durante 5 min, se dejó reposar durante 30 min y se observó la presencia de espuma de panal, que era indicativa de la presencia de saponinas.
- **Identificación de Taninos**
- (Reacción de cloruro férrico) (Auwal MS, 2014): A 2 mL de la solución acuosa del extracto se agregaron a unas gotas de solución de cloruro férrico al 10% (ligero amarillo). La aparición de color azul negruzco mostró la presencia de taninos gálicos y un color verde-negruzco presencia indicada de taninos catecol.
- Reacción con grenetina (Auwal MS, 2014): A 1 mL de extracto etanólico, se adicionaron 0.5 mL de reactivo de gelatina (0.5 g de grenetina pura aforado a 50 mL de agua destilada). Se observan cambios de coloración, si no se observan cambios, no hay presencia de Taninos.
- **Reacción de acetato de plomo** (Roopalatha Uc, 2013): Con la finalidad de identificar la presencia de fenoles en el extracto, se realiza esta prueba. unas pocas gotas de acetato de plomo al 10 % añadidas a 1 mL de la solución de prueba resultó en la formación de un precipitado amarillo confirmó la presencia de flavonoides.

## 2.3 Espectroscopia UV-Vis y FTIR

Los extractos obtenidos se analizaron en un espectrofotómetro UV-Vis marca Agilent, modelo CARY 60, las muestras se analizaron en el intervalo de 200 a 800 nm con una velocidad de escaneo de 300 nm/min. Asimismo, se obtuvieron los espectros de infrarrojo utilizando un espectrómetro de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR), Tensor II marca Bruker a una resolución de 4 cm<sup>-1</sup> de resolución, 32 escaneos realizados en un rango de entre 4000 a 500 cm<sup>-1</sup> utilizando un ATR punta de diamante (Peter J. Larkin, 2018) .

## 3 Resultados

### 3.1 Caracterización Fitoquímica de los extractos de la *Cocoloba uvifera*

En la tabla 1.1 se muestran los resultados obtenidos de los extractos de las hojas de la *Cocoloba uvifera* analizados mediante las diferentes pruebas fitoquímicas. Los extractos obtenidos con hexanos, metanol y etanol mostraron cambio de coloración con la reacción con cloruro férrico, grenetina, hidróxido de sodio al 10%, reacción de acetato de plomo al 10%, Shibitda y saponinas mostraron indicando la presencia de diferentes compuestos orgánicos indicados en la tabla. Los extractos obtenidos con acetato de etilo y acetona no mostraron la presencia de flavonas, flavonoles o ácido cafeico. Por lo tanto, los extractos contienen polifenoles con estructura tipo flavonoide (Auwal MS, 2014), (Roopalatha Uc, 2013).

**Tabla 1.1.** Resultados de las pruebas fitoquímicas realizadas con los diferentes extractos

No.	Pruebas Fitoquímicas	Compuestos Orgánicos	Coloración	Resultados				
				Solventes				
				Acetato de etilo	Hexano	Metanol	Etanol	Acetona
1	Cloruro férrico al %10	Taninos catecol	Verde oscuro	+	+	+	+	+
2	Grenetina	Taninos	Amarillo claro	+	+	+	+	+
3	Hidróxido de sodio al 10%	Antocianinas, chalconas, flavonas, flavonoles, xantonas	Rojiza	+	+	+	+	+
4	Reacción de acetato de plomo al 10%	Flavonas, flavonoles o ácido cafeico	Verde oscuro	-	+	+	+	-
5	Reacción de Shibita's	Flavonas	Verde claro	-	+	+	+	-
6	Prueba de Saponina	Saponina	N/A	+	+	+	+	+

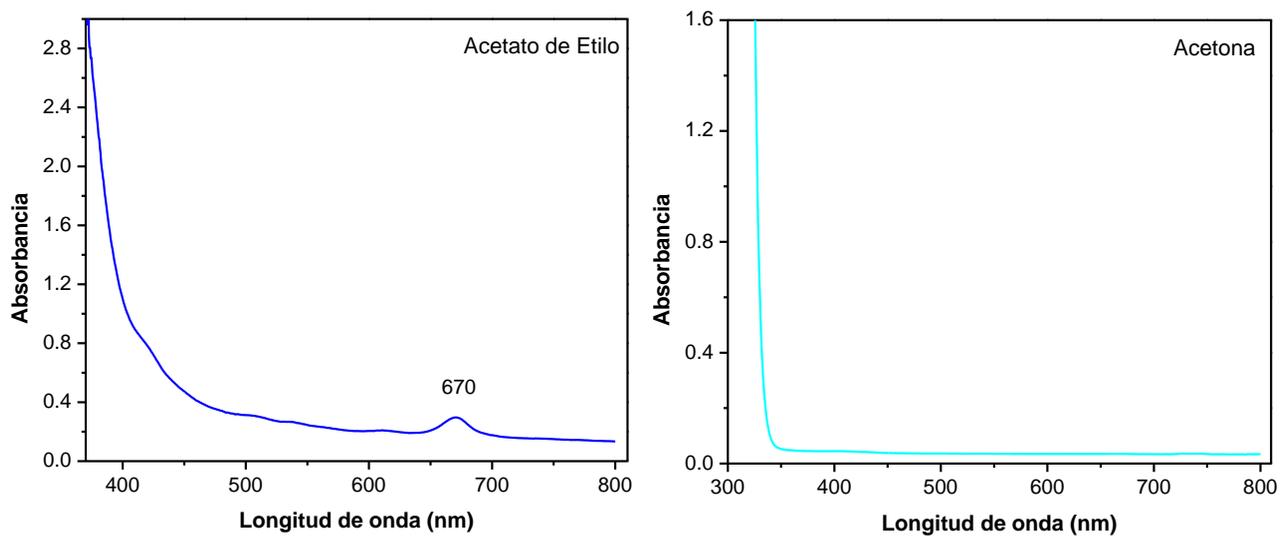
Fuente de Consulta: Elaboración Propia

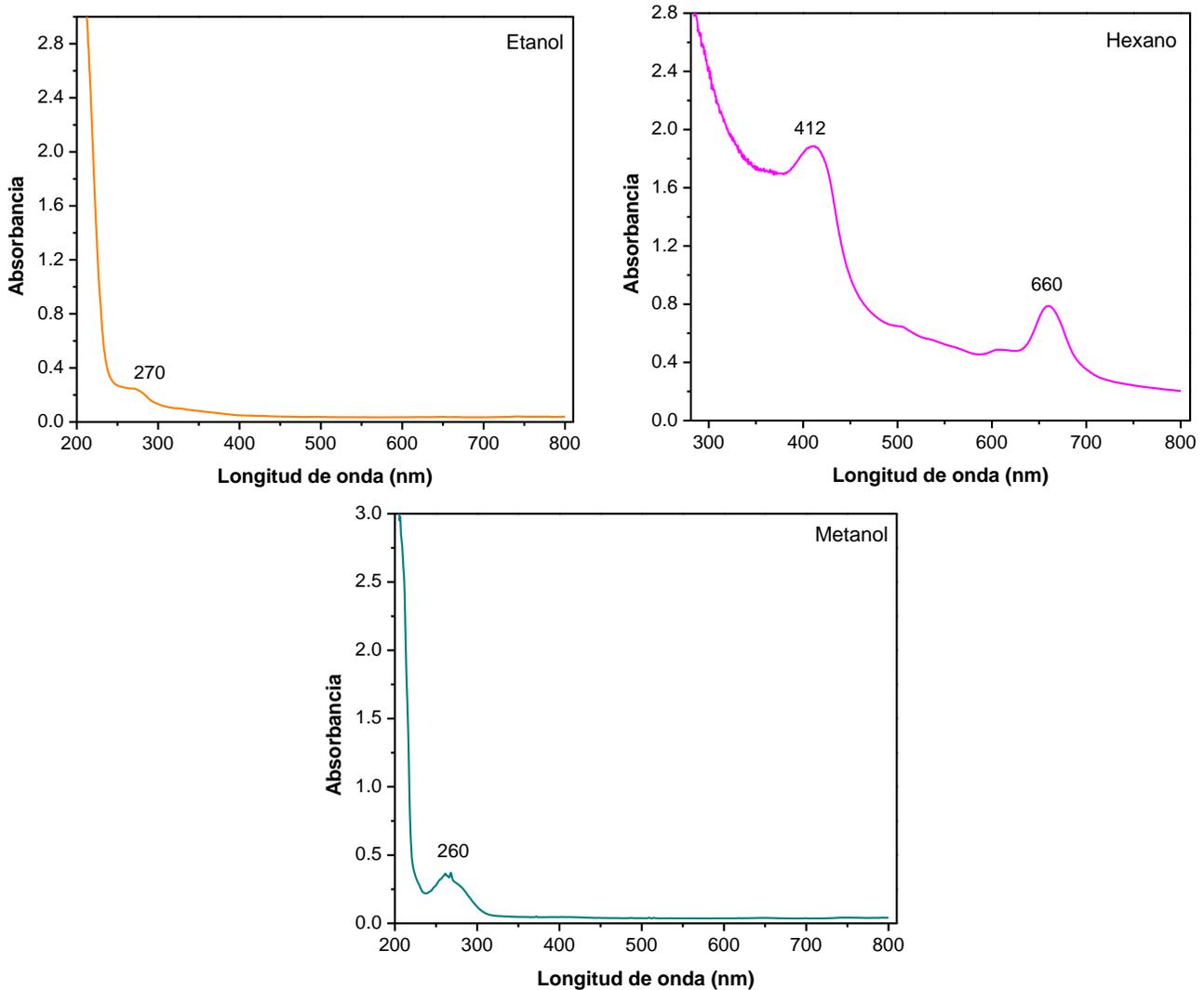
### 3.2 Caracterización espectroscópica de los extractos de la *Cocoloba uvifera*

#### 3.2.1 Espectroscopia UV-VIS

En la figura 1.1 se muestran los espectros UV-VIS de los diferentes extractos obtenidos con las hojas de la *Cocoloba uvifera* en el intervalo de 190 a 800 nm. En el espectro UV-Vis del extracto de acetato de etilo se describe un pico máximo en 670, que corresponde a un catión radical ABTS; el cual permite la determinación de la capacidad antioxidante (Shivali Singla et al, 2022). En el espectro del extracto de acetona, no se observó la presencia de algún pico máximo, esto indica que no contiene compuestos fenólicos (Roland Tolulope Loto, 2022). Por tanto, en el espectro UV-Vis del extracto etanólico se describe un pico máximo en 270 nm, el cual corresponde a un grupo fenol (Kumari Jyoti, 2016). En el espectro correspondiente al extracto hexánico se identifican dos picos máximos en 412 nm y 660 nm asociados a antocianinas y ABTS (Shivali Singla et al, 2022), por lo tanto, este extracto contiene polifenoles. Finalmente, en el espectro UV-Vis del extracto metanólico se presenta un pico máximo en 260 nm que está asociado al grupo fenol (Dasari Ayodhya, 2022).

**Gráfico 1.1** Espectro UV-Vis de los diferentes extractos obtenidos de las hojas de la *Coccoloba Uvifera*



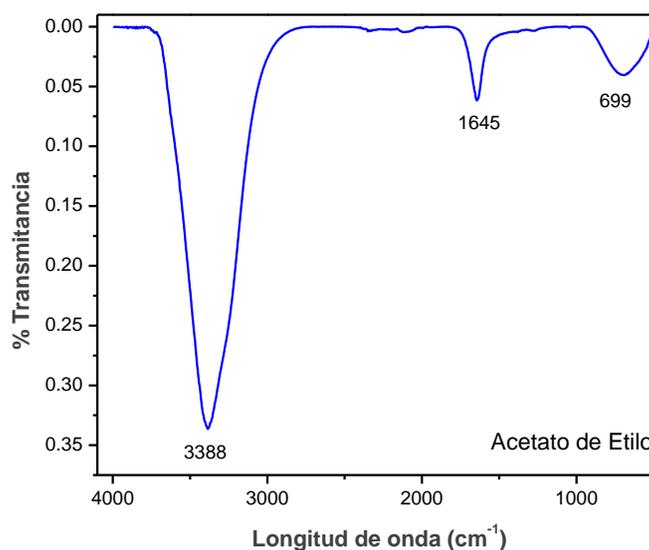


Fuente de Consulta: Elaboración Propia

### 3.2.2 Espectroscopia de Infrarrojo por Transmisión de Fourier (FTIR)

Con la finalidad de conocer los grupos presentes en los extractos obtenidos con diferentes solventes se analiza utilizando la técnica de FTIR. En el gráfico 1.2 se muestra el espectro obtenido del extracto de acetato de etilo, se describen tres bandas intensas en  $699\text{ cm}^{-1}$ ,  $1645\text{ cm}^{-1}$  y  $3388\text{ cm}^{-1}$ , las cuales se relacionan con grupos aromáticos (C-H “oop”), aminas primarias (N-H) y alcoholes fenoles (O-H) (Peter J. Larkin, 2018).

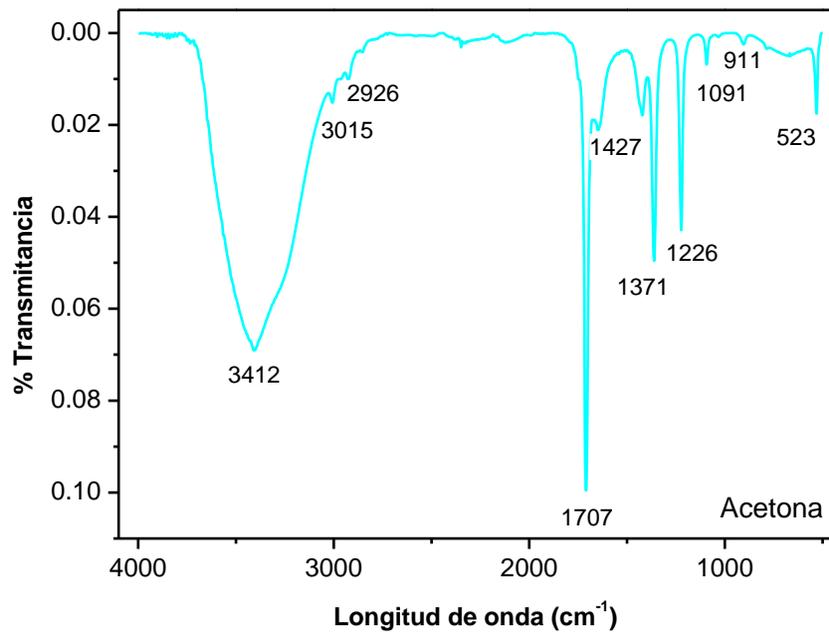
**Gráfico 1.2.** Espectro FTIR del extracto de la *Coccoloba Uvifera* obtenido en el solvente de acetato de etilo



Fuente de Consulta: Elaboración Propia

En el gráfico 1.3 se muestra el FTIR del extracto de acetona, se observan máximos en  $523\text{ cm}^{-1}$ ,  $911\text{ cm}^{-1}$ ,  $1091\text{ cm}^{-1}$ ,  $1226\text{ cm}^{-1}$ ,  $1427\text{ cm}^{-1}$ ,  $1371\text{ cm}^{-1}$ ,  $2926\text{ cm}^{-1}$ ,  $3015\text{ cm}^{-1}$  y  $3412\text{ cm}^{-1}$ , los cuales están asociados a los grupos funcionales de antocianinas, fenólicos aminas alifáticas (C-N), aromáticos (C-C), alcanos (C-H), ácidos carboxílicos (O-H, C-H), alcoholes y fenoles (O-H enlace H) (Nakayama, 2002) (Roland Tolulope Loto, 2022).

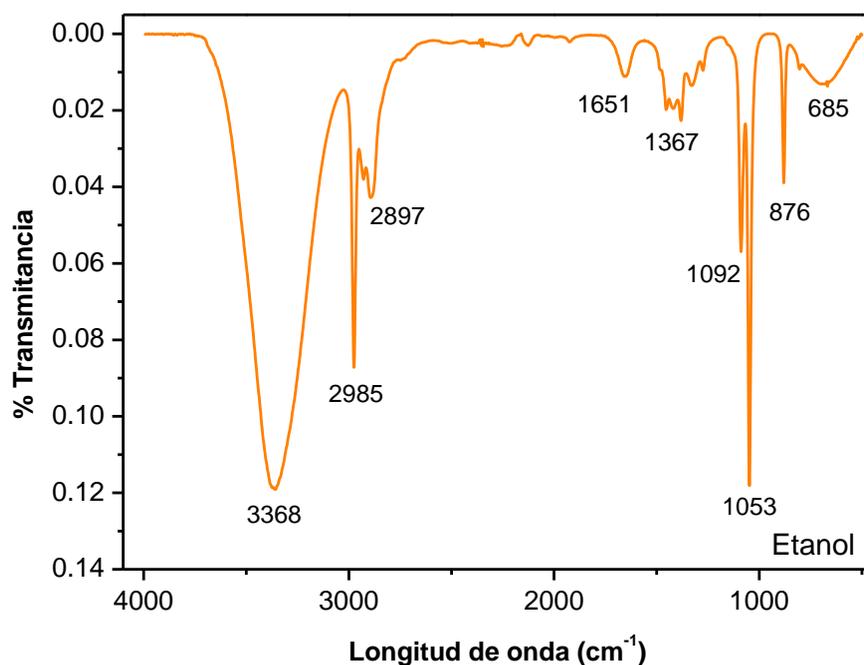
**Gráfico 1.3** Espectro FTIR del extracto de la *Coccoloba Uvifera* obtenido en el solvente de acetone



Fuente de Consulta: Elaboración Propia

Por otro lado, en el gráfico 1.4 se muestra el FTIR correspondiente al extracto de etanólico, se describen diferentes máximos en  $685\text{ cm}^{-1}$ ,  $876\text{ cm}^{-1}$ ,  $1053\text{ cm}^{-1}$ ,  $1092\text{ cm}^{-1}$ ,  $1367\text{ cm}^{-1}$ ,  $1651\text{ cm}^{-1}$ ,  $2897\text{ cm}^{-1}$ ,  $2985\text{ cm}^{-1}$  y  $3368\text{ cm}^{-1}$ , los cuales se asocian a los grupos de haluros de alquilo (C-Cl), aromáticos (C-C), aminas alifáticas (C-N), alcanos (C-H), alquenos (-C=C-), ácidos carboxílicos (O-H, C-H), alcoholes y fenoles (O-H enlace H) (Seyyed Arash Haddadi, 2019) (Roland Tolulope Loto, 2022).

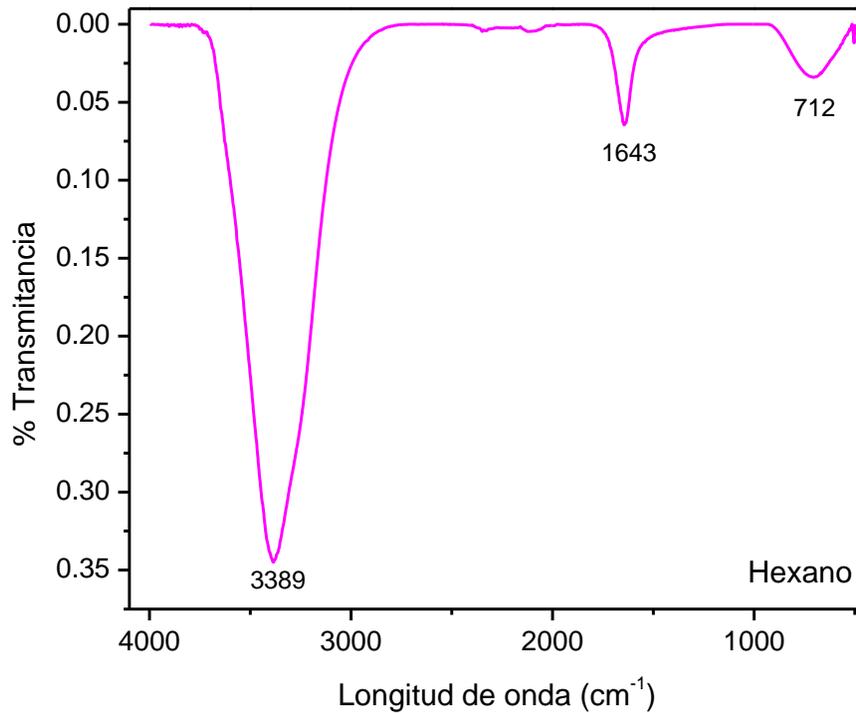
**Gráfico 1.4** Espectro FTIR del extracto de la *Coccoloba Uvifera* obtenido en el solvente de etanol



Fuente de Consulta: Elaboración Propia

Para el extracto hexánico (gráfico 1.5) se describen tres máximos en  $712\text{ cm}^{-1}$ ,  $1643\text{ cm}^{-1}$ ,  $3389\text{ cm}^{-1}$ . Los grupos funcionales establecidos son aromáticos (C-H “oop”), aminas primarias (C-N), alcoholes y fenoles (O-H enlace H) (German Chávez Díaz, 2022).

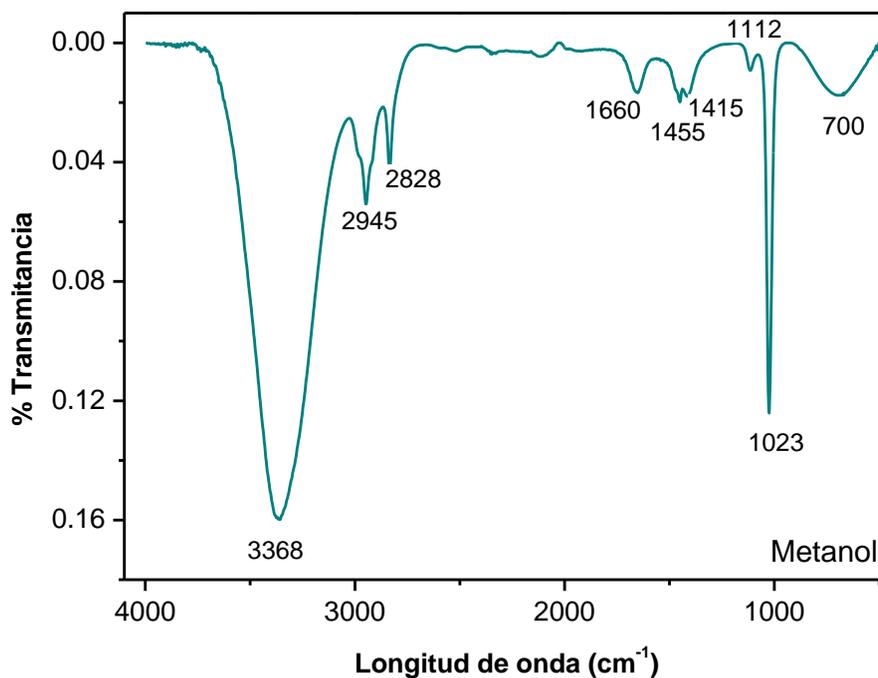
**Gráfico 1.5** Espectro FTIR del extracto de la *Coccoloba Uvifera* obtenido en el solvente hexane



Fuente de Consulta: Elaboración Propia

Finalmente, en el gráfico 1.6 se observa el espectro FTIR del extracto de metanol, en el cual se muestran varios máximos en  $700\text{ cm}^{-1}$ ,  $1023\text{ cm}^{-1}$ ,  $1112\text{ cm}^{-1}$ ,  $1415\text{ cm}^{-1}$ ,  $1455\text{ cm}^{-1}$ ,  $1660\text{ cm}^{-1}$ . Los grupos funcionales asociados son aromáticos (C-H “oop”), aminas alifáticas (C-N), alcoholes, ácidos carboxílicos, aromáticos (C-C) y fenoles (-C=C-) (Peter J. Larkin, 2018)

**Gráfico 1.6** Espectro FTIR del extracto de la *Coccoloba Uvifera* obtenido en el solvente metanol



Fuente de Consulta: Elaboración Propia

Los resultados indican que los extractos evaluados, está compuesto principalmente de aminas alifáticas, aromáticas, alcanos, alcoholes, ácidos carboxílicos, alquenos y compuestos fenólicos, lo cual se encuentra acorde con la literatura.

### Agradecimientos

HUCHIN-CHAN, Nancy del Carmen. PhD. con número de CVU 785518, agradece a CONACYT por la beca otorgada para realizar sus estudios de maestría. Los autores agradecen a CIMA-MUKUL, César Antonio. BsC, del Centro de Excelencia de Investigación en Servicios Petroleros y protección Ambiental (CEISPPA)-Facultad de Ingeniería de la UNACAR por brindar los medios para realización de la síntesis del extracto. A BASS-LÍPEZ, José Martín y ESCOBAR-MORALES, Beatriz. PhD del Centro de Investigación Científica de Yucatán (CICY) por su apoyo con las técnicas espectroscópicas.

### Conclusiones

Los extractos de las hojas de la *Coccoloba Uvifera* obtenidos con los diferentes solventes mostraron que dependiendo el tipo de solvente es posible obtener ciertos grupos orgánicos. Las pruebas fitoquímicas permitieron conocer cualitativamente la presencia diferentes compuestos orgánicos como antocianinas, chalconas, flavonas, flavonoles, xantonas, saponina y taninos. La técnica de UV-Vis confirmó la presencia de grupos antocianina, ácidos y compuestos fenólicos; a excepción del extracto de acetona que no manifiesta ningún pico de adsorción. Así mismo la técnica de FTIR ratificó la presencia de aminas, alcanos, ácidos carboxílicos, alquenos, fenoles, fundamentales para la caracterización. Considerando que los flavonoides constituyen un amplio grupo de compuestos orgánicos y que tienen una acción antioxidante, los extractos obtenidos se pueden evaluar como inhibidores verdes de corrosión.

### Referencias

- Adebayo, J. A. (23 de Octubre de 2021). Green inhibitor from *Thaumatococcus daniellii* Benn for corrosion mitigation of mild steel in 1M HCl. *Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, 10. doi:<https://doi.org/10.1016/j.crgsc.2021.100201>
- Auwal MS, S. S. (2014). Preliminary phytochemical and elemental analysis of aqueous and fractionated pod extracts of *Acacia nilotica* (Thorn mimosa). *Veterinary Research Forum*, 5, 95. doi:25568701
- Chen., P.-H. P.-Y.-Y.-J. (August de 2014). Protective effects of rutin on liver injury induced by biliary obstruction in rats. *Free Radical Biology and Medicine*, 73, 106-116. doi:<https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2014.05.001>
- Dasari Ayodhya, A. A. (2022, January). Green synthesis of CeO<sub>2</sub> NPs using *Manilkara zapota* fruit peel extract for photocatalytic treatment of pollutants, antimicrobial, and antidiabetic activities. *Results in Chemistry*, 4, 16. doi:<https://doi.org/10.1016/j.rechem.2022.100441>
- Ettiyappan., D. S. (July de 2022). Comprehensive information on extract optimization, phytochemical profile and biological evaluation of the medicinal plant *Nothapodytes foetida*. *Biocatalysis and Agricultural Biotechnology*, 42, 31. doi:<https://doi.org/10.1016/j.bcab.2022.102365>
- German Chávez Díaz, M. G. (30 de 03 de 2022). Inhibición de la corrosión del acero 1018 en medio salino por *Curcuma longa* 1018 steel corrosion inhibition in chloride media by *Curcuma longa*. *South Florida Journal of*, 3, 15. doi:<https://doi.org/10.46932/sfjdv3n2-063>
- Ginarte, R. P. (Marzo de 2016). *Medigraphic*, ON-LINE: ISSN 1028-4818. Recuperado el 30 de 10 de 2022, de Medigraphic: <https://www.medigraphic.com/pdfs/multimed/mul-2016/mul162a.pdf>
- Kuca, D. R. (16 de Octubre de 2022). Assessment of phytochemicals, antioxidants and in-silico molecular dynamic simulation of plant derived potential inhibitory activity of *Thalictrum foliolosum* DC. and *Cordia dichotoma* G. Forst. against jaundice. *Biomedicine & Pharmacotherapy*, 20. doi:<https://doi.org/10.1016/j.biopha.2022.113898>

Kumari Jyoti, M. B. (July de 2016). Characterization of silver nanoparticles synthesized using *Urtica dioica* Linn. leaves and their synergistic effects with antibiotics. *Journal of Radiation Research and Applied Sciences*, 9(3), 217-228. doi:<https://doi.org/10.1016/j.jrras.2015.10.002>

Mtairag, O. E. (12 de Octubre de 2022). Phytochemical characterization and immunomodulatory effects of aqueous, ethanolic and essential oil extracts of *Syzygium aromaticum* L. on human neutrophils. (D. B. Gyampoh, Ed.) *Scientific African*, Volumen 18, 9. doi:<https://doi.org/10.1016/j.sciaf.2022.e01395>

Peter J. Larkin. (2018). *Infrared and Raman Spectroscopy (Second Edition)*. (Peter J. Larkin, Ed.) *Elsevier*, 263. doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-804162-8.00001-X>

Roland Tolulope Loto, T. I. (January- February de 2022). Electrochemical action of *Citrus reticulata* and *Pelargonium* oil concentrates on 1018 carbon steel corrosion in anionic solution. *Journal of Materials Research and Technology*, 16, 1305-1323. doi:<https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2021.12.067>

Roopalatha Uc, V. M. (25 de July de 2013). Phytochemical analysis of successive reextracts of the leaves of *Moringa oleifera* Lam. *International Journal Pharmacy and Pharmaceutical Sciences*, 5, 6. Recuperado el 26 de 10 de 2022, de [https://www.researchgate.net/publication/282174443\\_Phytochemical\\_analysis\\_of\\_successive\\_reextracts\\_of\\_the\\_leaves\\_of\\_Moringa\\_oleifera\\_Lam](https://www.researchgate.net/publication/282174443_Phytochemical_analysis_of_successive_reextracts_of_the_leaves_of_Moringa_oleifera_Lam)

Seyyed Arash Haddadi, E. A. (15 de June de 2019). A detailed atomic level computational and electrochemical exploration of the *Juglans regia* green fruit shell extract as a sustainable and highly efficient green corrosion inhibitor for mild steel in 3.5 wt% NaCl solution. *Journal of Molecular Liquids*, 284, 682-699. doi:<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.04.045>

Shivali Singla et al, A. J. (Julio-Agosto de 2022). Green synthesis of silver nanoparticles using *Oxalis griffithii* extract and assessing their antimicrobial activity. *Open Nano*, 7. doi:<https://doi.org/10.1016/j.onano.2022.100047>

## Capítulo 7 Caracterización de electrolizadores con diferentes campos de flujo

### Chapter 7 Characterization of electrolyzers with different flow fields

SÁNCHEZ-MARTÍNEZ, Víctor Alberto†\*, FIGUEROA-RAMÍREZ, Sandra Jazmín, SIERRA-  
GRAJEDA, Juan Manuel Tadeo y PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal

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

ID 1<sup>er</sup> Autor: *Víctor Alberto, Sánchez-Martínez* / **ORC ID:** 0000-00030487-8323, **CVU CONACYT ID:**  
1088487

ID 1<sup>er</sup> Coautor: *Sandra Jazmín, Figueroa-Ramírez* / **ORC ID:** 0000-0003-1368-1741, **CVU CONACYT  
ID:** 164797

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *Juan Manuel Tadeo, Sierra-Grajeda* / **ORC ID:** 0000-0002-0565-6450, **CVU  
CONACYT ID:** 219284

ID 3<sup>er</sup> Coautor: *Cristóbal, Patiño-Carachure* / **ORC ID:** 0000-0002-1436-1259, **CVU CONACYT ID:**  
226327

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.59.69

V. Sánchez, S. Figueroa, J. Sierra y C. Patiño

\* 100776@mail.unacar.mx

O. Benavides & A. Flores (VV. AA.). Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente. Handbooks- TII- ©ECORFAN-  
Mexico, 2022.

## Resumen

En el presente trabajo se llevó a cabo la caracterización de tres electrolizadores tipo PEM en monocelda con distintos campos de flujo: pines cuadrados, pines circulares y circulares en zigzag. Asimismo, se determinó la cantidad de hidrógeno producido para cada diseño a diferentes potenciales, tiempos y temperaturas. A partir de estas mediciones y con la finalidad de observar la influencia de los diferentes campos de flujo, se compararon curvas de polarización y gráficos de producción de hidrógeno contra el tiempo. Asimismo, se construyó un sistema de suministro de agua con el cual se lograron almacenar y cuantificar el hidrógeno y el oxígeno producido. Los resultados demostraron que tanto el potencial como el tiempo son las variables con mayor impacto en la producción de hidrógeno; el campo de flujo con pines cuadrados generó más hidrógeno que los diseños con pines circulares y el diseño en zig-zag generó más hidrógeno que el convencional.

## Electrolizador, PEM, Hidrógeno, Campos de Flujo

### Abstract

In the present work, the characterization of three single cell PEM electrolyzers with different flow field: square, circular and circular zigzag pin flow fields was carried out. Thus, the amount of hydrogen produced for each design at different potentials, times and temperatures was also determined. From these measurements and in order to observe the influence of the different flow fields, polarization curves and graphs of hydrogen production versus time were compared. A water supply system was also constructed to store and quantify the hydrogen and oxygen produced. The results showed that both potential and time are the variables with the greatest impact on hydrogen production; the flow field with square pins generated more hydrogen than the designs with circular pins and the zig-zag design generated more hydrogen than the conventional one.

## PEM electrolyzer, Flow-Fields, Hydrogen production

### 1 Introducción

El uso de los combustibles fósiles ha sido fundamental para el desarrollo de la sociedad desde el siglo XX y su uso como fuente de energía primaria ha sido la principal causa de la emisión de Gases de Efecto Invernadero (GEI) a la atmósfera (Posso, 2000). Entre las distintas fuentes de energía primaria se encuentran las energías renovables que incluyen desde la energía solar, eólica, biomasa, hidroeléctrica, mareomotriz y geotermia. Todas estas cumplen con el concepto de energía obtenida por la naturaleza de forma repetitiva y con un flujo de energía persistente en el ambiente local (Twidell, 2006).

Por otra parte, el uso del Hidrógeno como vector energético ayudará en un futuro cercano ayudará a satisfacer la demanda energética de los países debido a su capacidad para almacenar y transportar la energía producida por las energías renovables, en 2018 se produjeron 116.95 PJ (1.8 % de la energía nacional) de energía a partir de fuentes de Hidrógeno, estos datos pertenecen al balance nacional de energía y ha sido producido a partir de diversos recursos renovables y no renovables, (Kumar, 2019).

En el caso de los recursos energéticos no renovables, se utilizan los procesos de reformado con vapor, gasificación del carbón y oxidación parcial. En el caso de los recursos renovables, se emplean la biomasa, fuentes biológicas y electrólisis del agua. (Chi, 2018), afirma que la electrólisis del agua es un proceso donde el reactante es disociado del Hidrógeno y el Oxígeno por la influencia de la corriente directa. (Grigoriev, 2020) menciona que existen principalmente 3 tipos de celdas electrolíticas o electrolizadores que permiten trabajar con la electrólisis del agua, como lo son los alcalinos, de óxido sólido y de membrana de intercambio protónico o PEM por sus siglas en inglés. Sin embargo, para lograr la mayor eficiencia, determinar las condiciones óptimas de operación y prevenir la degradación de la MEA de un electrolizador, es necesario construir nuevos diseños y evaluarlos a diferentes condiciones, (López, 2014 y Rakousky, 2017).

De acuerdo con (Pino, 2009) los electrolizadores PEM pueden llegar hasta el 94% de eficiencia, pero por ahora esto es algo teórico.

En este trabajo se presenta un estudio para comparar el desempeño de tres electrolizadores de 25 cm<sup>2</sup> de área activa con diferentes campos de flujo (pines cuadrados, pines circulares y pines circulares en zigzag) mediante curvas de polarización, los cuales fueron evaluados en arreglos de monoceldas a temperatura ambiente y empleando un flujo continuo de agua de 1.67 L/min. Asimismo, para cada uno de ellos se determina la producción de hidrógeno en función del potencial y el tiempo de operación.

## 2 Metodología

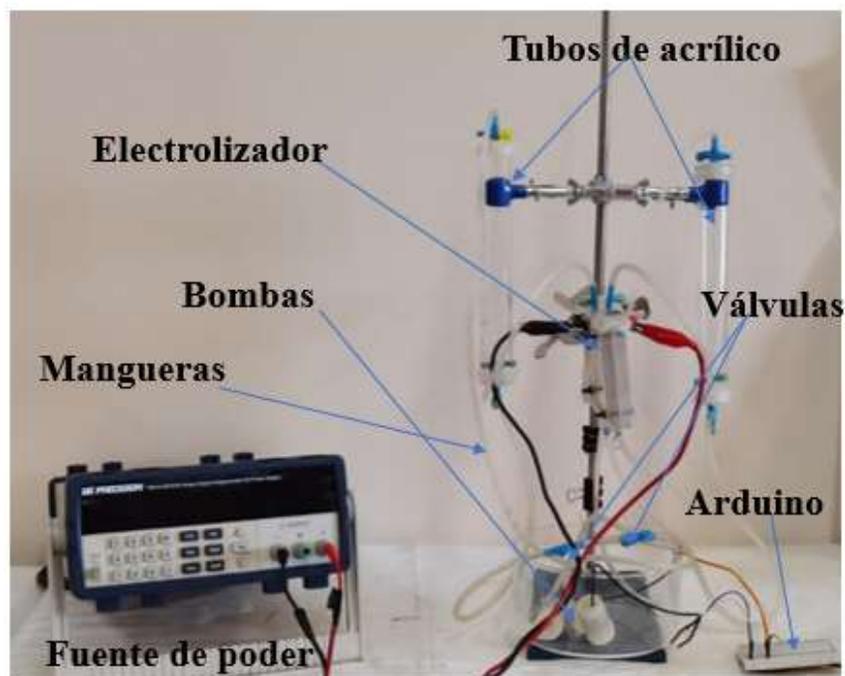
Para llevar a cabo la caracterización de los tres electrolizadores primero se diseñó y construyó un sistema de suministro de agua por bombeo y de almacenamiento del hidrógeno y oxígeno. Después se realizó la prueba de fugas tanto en el sistema como en cada electrolizador. Para garantizar que la única variable en el estudio fuera el campo de flujo, se utilizaron ensamblajes membrana-electrodos comerciales de 3 capas de la marca Fuel Cell Store ® y mallas de Titanio Platinizado.

### 2.1 Sistema de suministro de agua y almacenamiento de gases

El sistema de suministro de agua y almacenamiento de gases (Hidrógeno y Oxígeno) Figura 1, consiste en dos bombas sumergibles de corriente directa, una tarjeta Arduino con componentes electrónicos programada para regular el voltaje aplicado a las bombas y controlar el caudal, un contenedor de agua de 1.5 L, mangueras, válvulas, dos tubos de acrílico y una fuente de poder para aplicar el potencial a cada electrolizador. Una vez verificado el correcto funcionamiento del sistema se procedió con el llenado del contenedor con  $\frac{3}{4}$  partes de agua desionizada, después se introdujeron las bombas sumergibles, se conectaron mangueras y válvulas para guiar el flujo hacia los tubos de acrílico (cilindros de almacenamiento de H<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>) y llenarlos de agua, posteriormente se conectaron las mangueras de salida de agua de los cilindros hacia el electrolizador y se conectaron las mangueras de salida de los gases del electrolizador al sistema de almacenamiento.

Después se conectan los cables de la fuente de poder a las terminales del electrolizador, se encienden las bombas de agua para el llenado de los cilindros y electrolizador y finalmente con la fuente de poder se genera la diferencia de potencial ( $\Delta E$ ) necesaria para que el agua se separe. De esta manera los gases producidos son enviados a los tubos de acrílico y estos van desplazando al agua que se encuentra en los tubos, comenzando a almacenarse en la parte superior de los cilindros y comienza a registrarse el volumen de cada gas.

**Figura 1** Sistema de Alimentación y almacenamiento



*Fuente: Elaboración Propia*

## 2.2 Caracterización electroquímica

Una vez que los electrolizadores comienzan a generar burbujas a un potencial inicial se procede con su caracterización mediante la aplicación de diferentes potenciales y el registro de la intensidad de corriente demandada por cada electrolizador. Para generar la curva de polarización se utilizó un intervalo de potencial de 1.4 V a 2.5 V con incrementos de 0.1V. Es importante mencionar que el potencial teórico utilizado para separar la molécula del agua es de 1.23 V. Para los electrolizadores de este estudio se observó que la producción de hidrógeno inició en  $\approx 1.5V$ .

## 3 Resultados

En esta sección se muestran los resultados obtenidos en cada uno de los electrolizadores, primero se presenta la curva de polarización de cada electrolizador, posteriormente las gráficas de medición de volumen de hidrógeno producido a diferentes potenciales de operación y finalmente la cuantificación de hidrógeno y oxígeno a diferentes intervalos de tiempo y un potencial máximo fijo. Finalmente se muestra una gráfica comparativa de la producción de hidrógeno para los tres electrolizadores con distinto campo de flujo.

### 3.1 Electrolizador de pines cuadrados

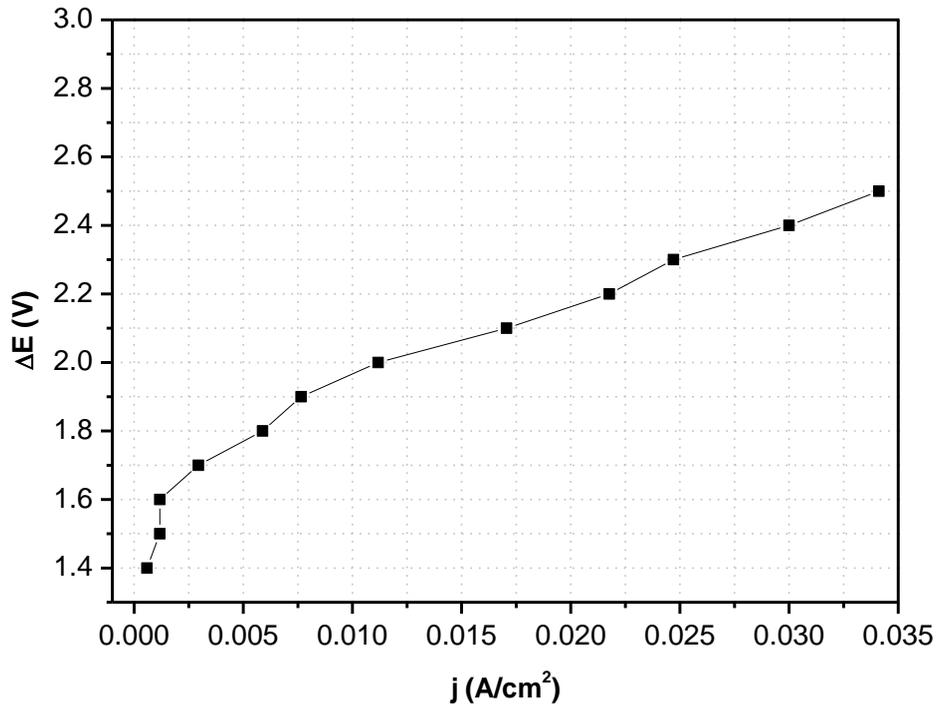
En la Figura 2 se muestra el electrolizador tipo PEM con campo de flujo de pines cuadrados, tiene un área activa de  $25\text{ cm}^2$ , el ensamble membrana/electrodos o MEA es de 3 capas y está compuesto de una membrana Nafion 115, con depósito de Pt/C (Cátodo) e Ir/Ru (Ánodo), adicionalmente se empleó una malla de Titanio platinizado de 7 milésimas de espesor como difusor y colector de corriente en ambos lados de la MEA y dos sellos de teflón.

**Figura 2** Electrolizador de pines cuadrados

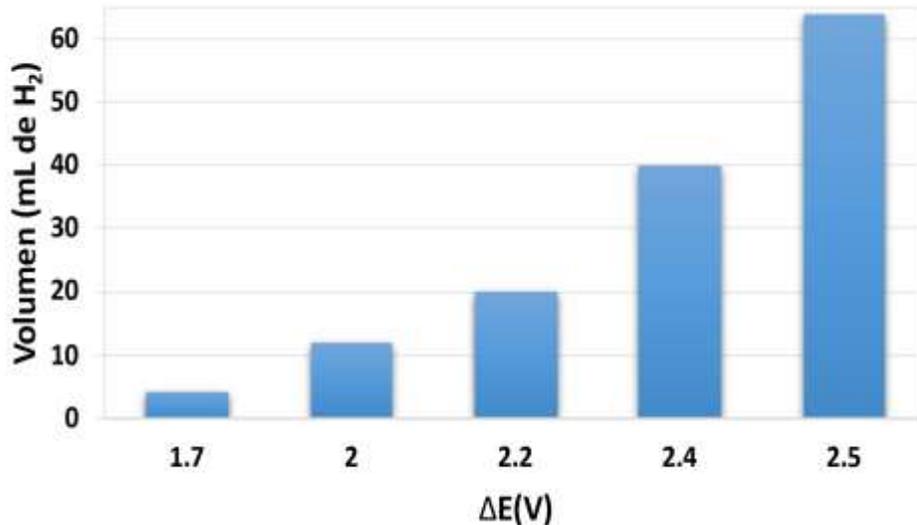


*Fuente: Elaboración Propia*

En la Gráfico 1 se muestra la curva de polarización de este electrolizador y como se puede observar, a mayor potencial, mayor es la densidad de corriente ( $j$ ), para el potencial máximo de este estudio (2.5 V), se obtuvo una densidad de corriente de  $0.03412A/cm^2$ .

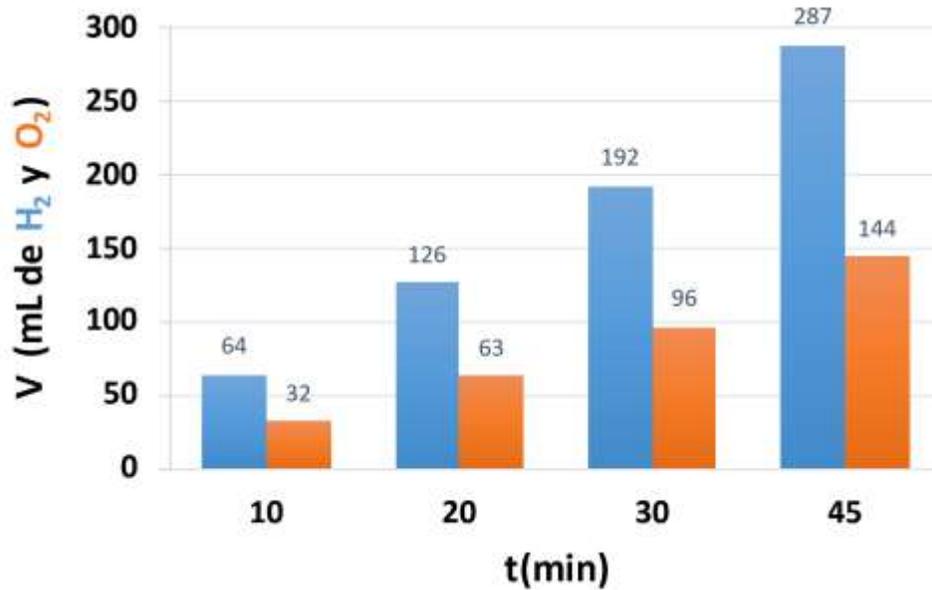
**Gráfico 1** Curva de polarización del electrolizador de pines cuadrados

Para el estudio de la producción de hidrógeno a diferentes potenciales, el electrolizador se mantuvo a diferentes potenciales durante 10 min para registrar el volumen producido. En la Gráfico 2 se observa que la mayor producción se obtuvo con el potencial de 2.5 V.

**Gráfico 2** Producción de hidrógeno a diferentes  $\Delta E$ 

Finalmente, en el estudio de la producción de hidrógeno y oxígeno contra el tiempo (Gráfico 3), se deja fijo el potencial y se registran los volúmenes obtenidos en intervalos de 10, 20, 30 y 45 minutos. Se determinó que este electrolizador puede producir hasta 287 mL de hidrógeno y 144 mL de oxígeno en 45 min.

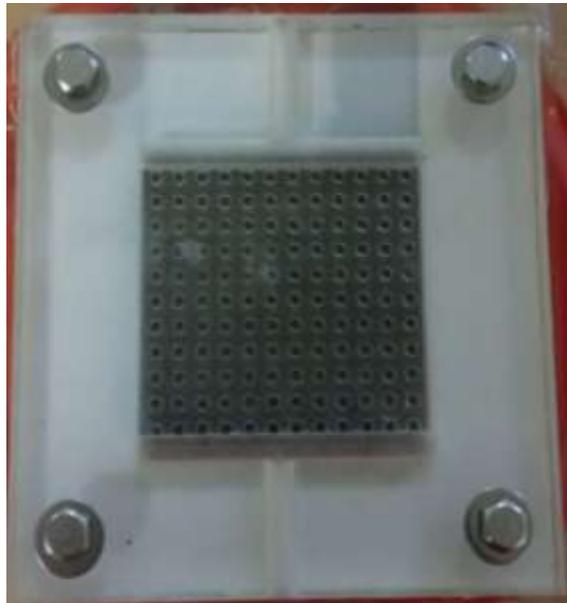
**Gráfico 3** Producción de hidrógeno y oxígeno a  $\Delta E= 2.5$  V en función del tiempo



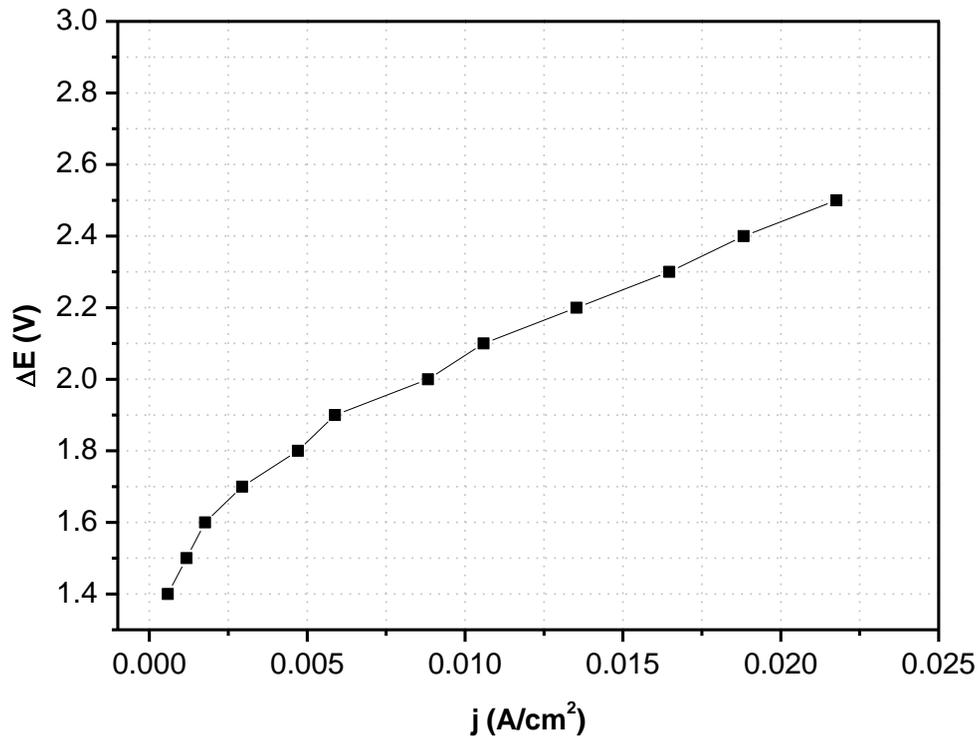
### 3.2 Electrolizador de pines circulares

En la Figura 3 se muestra el electrolizador con campo de flujo con pines circulares, las características de la MEA son las mismas que las del electrolizador anterior; sin embargo, respecto al campo de flujo, el uso de los pines circulares se propuso con la finalidad de evitar el estancamiento de burbujas de gas en la base de los pines cuadrados, lo que impedía un aprovechamiento óptimo del área activa y menores tasas de reacción durante la electrólisis.

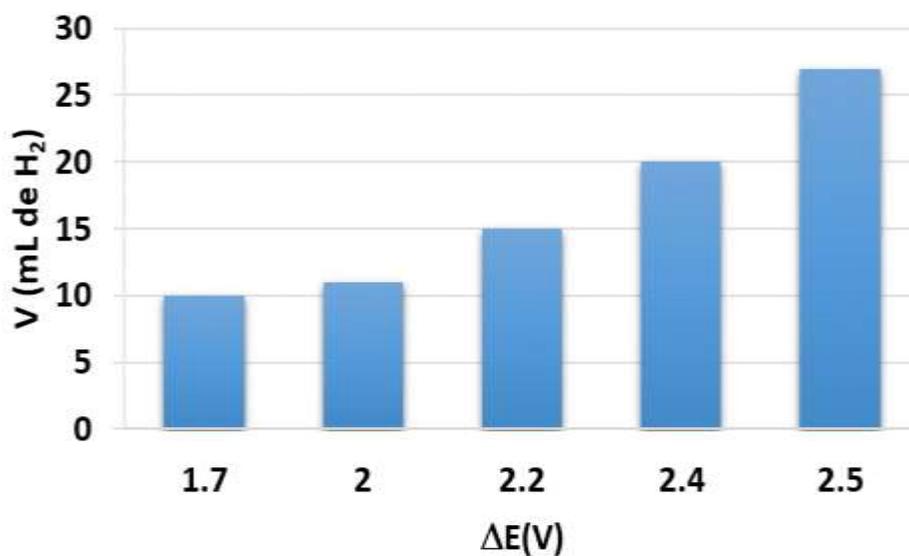
**Figura 3** Electrolizador de pines circulares



En la Gráfico 4 se muestra la curva de polarización de este electrolizador, a diferencia del electrolizador de pines cuadrados en este se observaron densidades de corriente inferiores a los  $0.0148$  A/cm<sup>2</sup>, por lo que su desempeño fue menor y con una producción de hidrógeno más baja, la propuesta del diseño circular para evitar el estancamiento de burbujas no resultó favorable en las pruebas de caracterización.

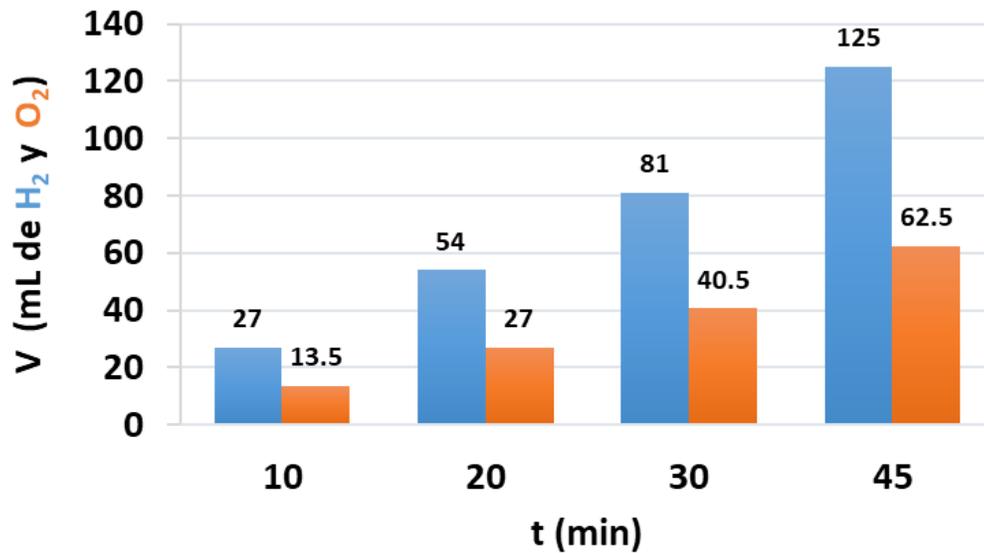
**Gráfico 4** Curva de polarización del electrolizador de pines circulares

En el estudio de la producción a diferentes potenciales (Gráfico 5), al igual que en el electrolizador anterior, se observó una mayor producción conforme el  $\Delta E$  incrementa; sin embargo, el volumen de hidrógeno producido fue menos de la mitad que el obtenido con el electrolizador de pines cuadrados, por lo que el flujo laminar entre los canales con pines circulares no favoreció la producción de hidrógeno.

**Gráfico 5** Producción de hidrógeno a diferentes  $\Delta E$ 

Finalmente, en el estudio de la producción contra el tiempo (Gráfico 6), se mantuvo fijo el potencial y se registraron los volúmenes en intervalos de 10, 20, 30 y 45 minutos. Se determinó que este electrolizador puede producir hasta 125 mL de hidrógeno y 62.5 mL de oxígeno en 45 min, resultando en un rendimiento mucho más bajo que el electrolizador de pines cuadrados.

**Gráfico 6** Producción de hidrógeno y oxígeno a  $\Delta E = 2.5$  V en función del tiempo



### 3.3 Electrolizador de pines circulares en zigzag

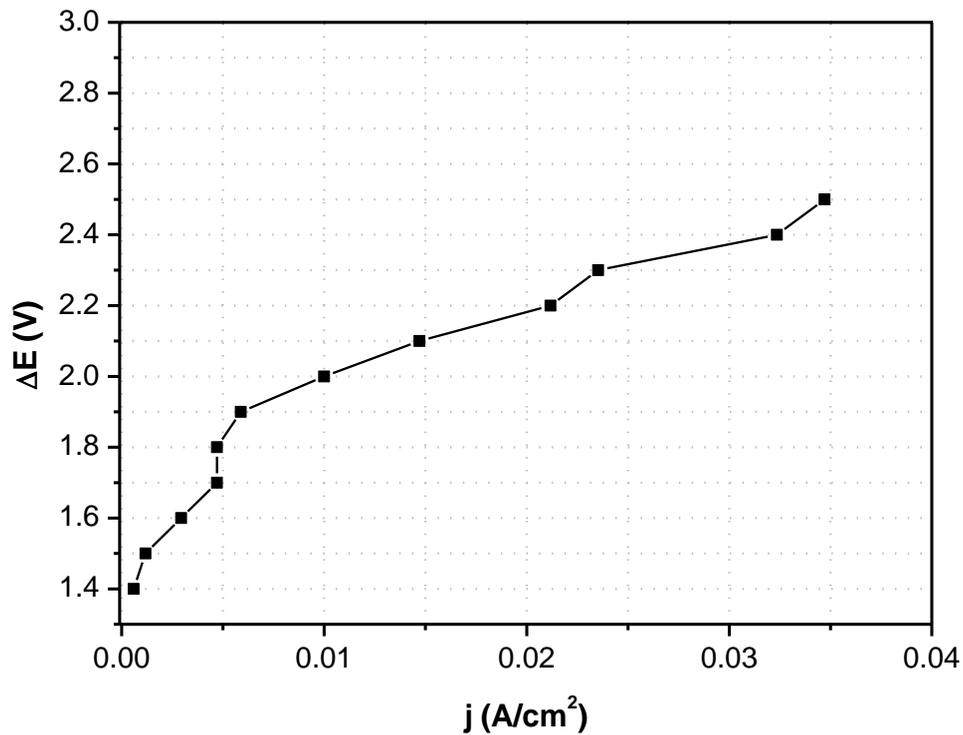
En la Figura 4 se observa el electrolizador de pines circulares con campo de flujo en zigzag, este electrolizador también fue maquinado con la finalidad de incrementar la tasa de reacción entre el agua y los catalizadores, pero debido al desempeño del campo de flujo anterior se propuso un diseño en zig-zag para promover una mayor turbulencia en el flujo y evitar el estancamiento de burbujas en la base de los pines.

**Figura 4** Electrolizador de pines circulares con campo de flujo en zigzag



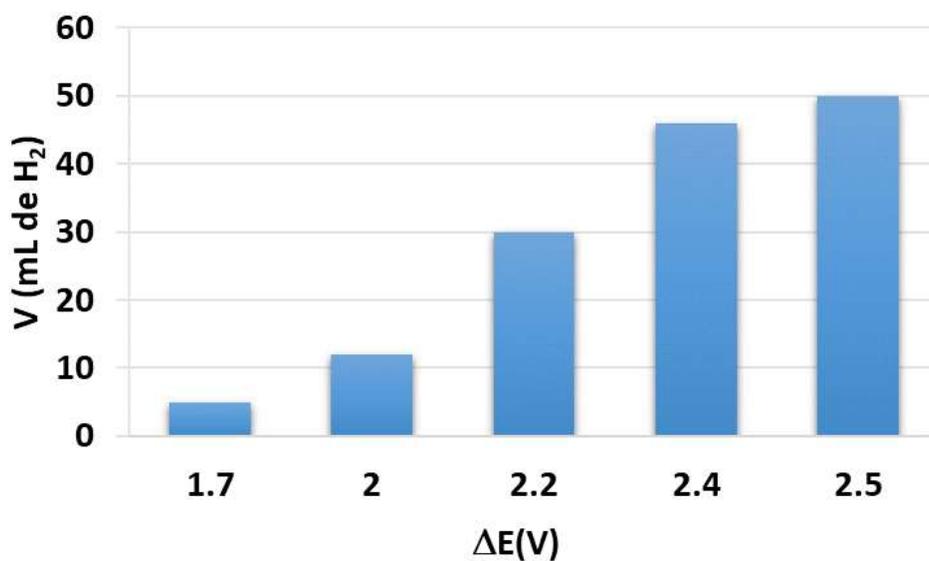
En el Gráfico 7 se muestra la curva de polarización del electrolizador, como se puede observar este diseño presentó una mayor densidad de corriente en comparación al electrolizador de pines circulares rectos (Figura 3) y prácticamente la misma densidad de corriente que el de pines cuadrados, por lo que se puede comprobar que bajo esas condiciones de flujo y temperatura el desempeño fue el mismo y se puede esperar una producción de hidrógeno similar al de pines cuadrados.

**Gráfico 7** Curva de polarización del electrolizador de pines circulares de zig-zag



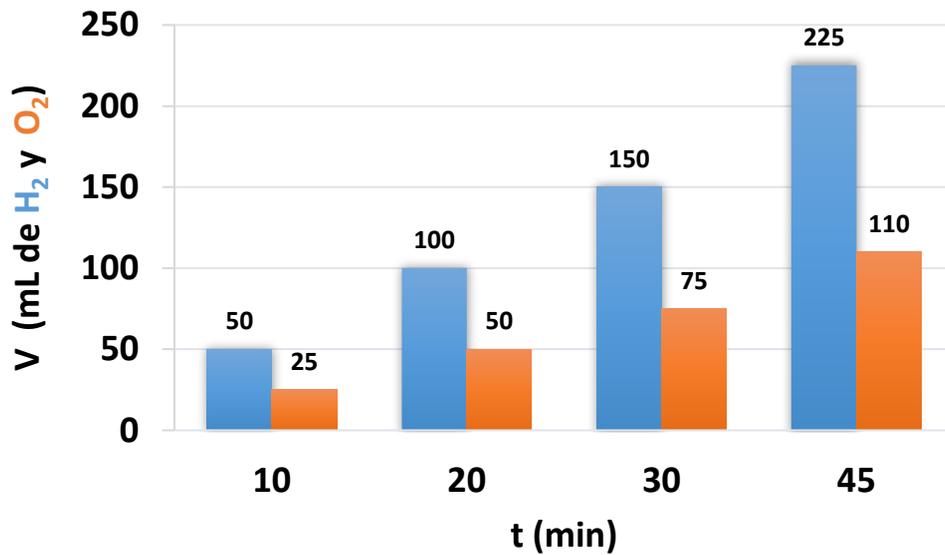
En la Gráfico 8 se presenta la gráfica de producción de hidrógeno a diferentes tiempos para el electrolizador con pines circulares en zig-zag, como se observa en la gráfica este diseño mejoró la producción de hidrógeno y se obtuvo una producción de 50 mL a un potencial de 2.5 V, el doble del obtenido con el diseño de pines circulares convencional.

**Gráfico 8** Producción de hidrógeno y oxígeno a  $\Delta E = 2.5$  V en función del tiempo



En la Gráfico 9 se observa la producción de hidrógeno a diferentes tiempos y como era de esperarse, la modificación de este campo de flujo mejoró la producción de hidrógeno, alcanzando un valor de 225 mL, es decir 100 mL más del obtenido solo con los pines circulares.

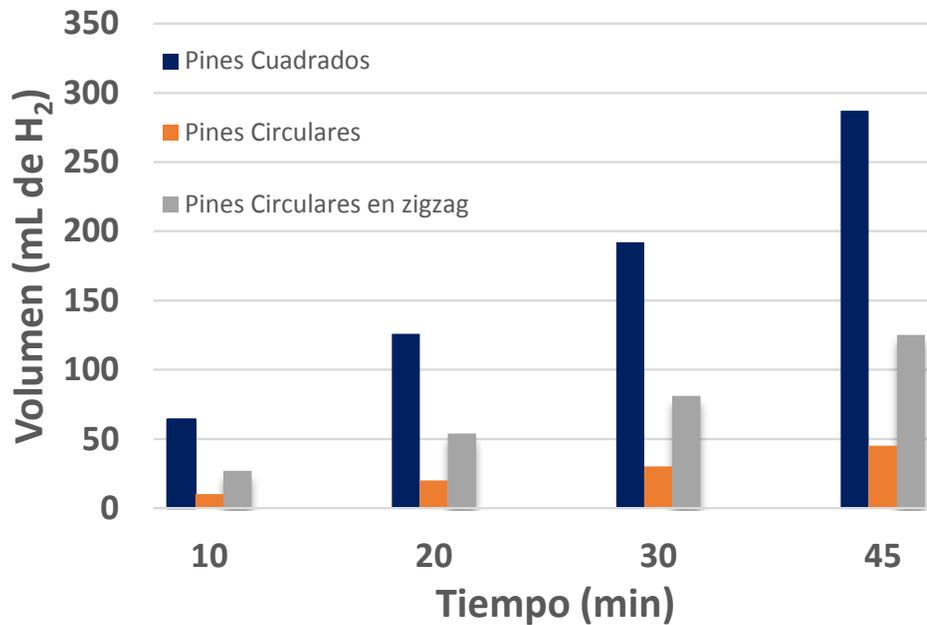
**Gráfico 9** Producción de hidrógeno y oxígeno a  $\Delta E = 2.5$  V en función del tiempo



### 3.4 Comparativa de la producción

En la Gráfico 10 se observa una gráfica comparativa de la producción de hidrogeno de los tres electrolizadores evaluados en este trabajo. El electrolizador con pines cuadrados presentó la mayor producción de hidrógeno en cada intervalo de tiempo, alcanzando un volumen de 287 mL para un tiempo de 45 min. El electrolizador con pines circulares no mejoró el rendimiento de la MEA con su diseño; sin embargo, el electrolizador con pines circulares en zig-zag superó significativamente al diseño convencional de pines circulares por lo que la modificación de su arquitectura/campo de flujo, sí demostró una influencia positiva en su desempeño, por lo tanto, la combinación de ambos criterios de promover un flujo turbulento y el diseño de pines circulares para evitar el estancamiento de burbujas sí favorece la tasa de reacción del agua con los electrocatalizadores e incrementa su rendimiento.

**Gráfico 10** Gráfica comparativa de la producción de hidrógeno de los electrolizadores caracterizados.



## 4 Conclusiones

En este trabajo se caracterización tres electrolizadores con distintos campos de flujo: pines cuadrados, pines circulares y pines circulares en zig-zag con la finalidad de demostrar el impacto del campo de flujo en su desempeño y volumen de hidrógeno producido. El electrolizador con campo de flujo de pines cuadrados presentó una mayor producción de hidrógeno en comparación con los demás electrolizadores; el electrolizador con campo de flujo de pines circulares presentó el desempeño más bajo; sin embargo, el electrolizador con pines circulares en zigzag demostró una mejora significativa comparado con el diseño convencional logrando obtener rendimientos similares al de pines cuadrados. Los criterios planteados para incrementar la tasa de reacción y promover la turbulencia en el campo de flujo sí tuvieron un impacto positivo en el desempeño del ensamble membrana/electrodos por lo que es necesario realizar estudios más puntuales sobre estos aspectos. Finalmente se pudo determinar que el tiempo y potencial son las variables que más afectan a la producción de hidrógeno, a mayor potencial y tiempo de operación se obtendrá una producción de hidrógeno más alta.

## 5 Agradecimientos

Víctor Alberto Sánchez Martínez agradece CONACyT por la beca otorgada para realizar sus estudios en el Programa de Maestría en Ingeniería de Materiales y Energía, UNACAR y al proyecto No. 254667 “Consolidación del laboratorio de Energía Renovable del Sureste” LENERSE de CONACyT por los materiales y equipos adquiridos.

## 6 Referencias

- Posso. (2000). Energía y ambiente: pasado, presente y futuro, parte Uno: Sistema Energético Basado en Fuentes Fósiles. *Geoenseñanza*, 5(2), 1316-6077. <https://www.redalyc.org/pdf/360/36050204.pdf>
- Twidell, J. (2006, 2 mayo). *Renewable Energy Resources* | John Twidell | Taylor & Francis eBooks, R. Taylor & Francis. <https://www.taylorfrancis.com/books/mono/10.4324/9780203478721/renewable-energy-resources-john-twidell>
- Shiva Kumar, S. & Himabindu, V. (2019). Hydrogen production by PEM water electrolysis – A review. *Materials Science for Energy Technologies*, 2(3), 442-454. <https://doi.org/10.1016/j.mset.2019.03.002>
- Chi, J. & Yu, H. (2018). Water electrolysis based on renewable energy for hydrogen production. *Chinese Journal of Catalysis*, 39(3), 390-394. [https://doi.org/10.1016/s1872-2067\(17\)62949-8](https://doi.org/10.1016/s1872-2067(17)62949-8)
- Grigoriev, S., Fateev, V., Bessarabov, D. & Millet, P. (2020). Current status, research trends, and challenges in water electrolysis science and technology. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(49), 26036-26058. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.03.109>
- Lopez M. (2014). DISEÑO Y MANUFACTURA DE PROTOTIPOS ELECTROLIZADOR-CELDA DE COMBUSTIBLE [Tesis de licenciatura]. Instituto Politécnico Nacional.
- Rakousky, C., Reimer, U., Wippermann, K., Kuhri, S., Carmo, M., Lueke, W. & Stolten, D. (2017). Polymer electrolyte membrane water electrolysis: Restraining degradation in the presence of fluctuating power. *Journal of Power Sources*, 342, 38-47. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.11.118>

## Capítulo 8 Degradación de hidrocarburos alifáticos de petróleo crudo en medio mineral utilizando un consorcio bacteriano

### Chapter 8 Degradation of aliphatic hydrocarbons from crude oil in mineral medium using a bacterial consortium

RAMIREZ-ELIAS, Miguel\*, BENITEZ-PINEDA, Paulo, ANGUEBES-FRANSESCHI, Francisco y MONTALVO-ROMERO, Carlos

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

ID 1<sup>er</sup> Autor: *Miguel Ángel, Ramírez-Elías* / **ORC ID:** 0000-0002-3962-1117, **CVU CONACYT ID:** 256557

ID 1<sup>er</sup> Coautor: *Paulo Alberto, Benítez-Pineda* / **ORC ID:** 0000-0002-4340, **CVU CONACYT ID:** 920418

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *Francisco, Anguebes-Franceschi* / **ORC ID:** 0000-0002-8190-2211, **CVU CONACYT ID:** 217824

ID 3<sup>er</sup> Coautor: *Carlos, Montalvo-Romero* / **ORC ID:** 0000-0002-6761-3261, **CVU CONACYT ID:** 339918

**DOI:** 10.35429/H.2022.10.70.80

M. Ramirez, P. Benítez, F. Anguebes y C. Montalvo.

\* mramirez.unacar@gmail.com

O. Benavides & A. Flores (VV. AA.). Ingeniería y Materiales Aplicados al Medio Ambiente. Handbooks- TII- ©ECORFAN-Mexico, 2022.

## Resumen

En el presente estudio se utilizaron las bacterias: *Serratia marcescens* y *Microbacterium nematophilum* en forma de consorcio bacteriano, que se inoculó en un medio mineral, utilizando petróleo crudo medio (22,4 °API) al 1% en volumen como única fuente de carbono. Se realizaron medidas de Espectroscopía Infrarroja (FT-IR) a diferentes intervalos de tiempo de contacto (7, 14 y 21 días) para identificar los grupos de hidrocarburos degradados, siendo éstos en mayor proporción los de la región de hidrocarburos alifáticos frente a los aromáticos. Por otro lado, 21 días después de la prueba de degradación del crudo, se confirmó por cromatografía de gases (GC-FID) que el consorcio bacteriano degradó los hidrocarburos alifáticos de C15 a C36. Los mayores porcentajes de degradación de alifáticos (n-alcenos) fueron C32 y C36 con un 100% y los menores porcentajes de degradación fueron alcanos isoprenoides; Pristano y Fitano con un 10% y 4%, respectivamente. Finalmente, el consorcio bacteriano formado por *S. marcescens* y *M. nematophilum* representa una buena alternativa para la biodegradación de hidrocarburos alifáticos (n-alcenos) presentes en crudo medio, representativo de la mezcla mexicana que se explota y produce en la Sonda de Campeche, México.

## Biodegradación, Hidrocarburos alifáticos, Petróleo crudo, Espectroscopia, Cromatografía

### Abstract

In the present study, the bacteria were used: *Serratia marcescens* and *Microbacterium nematophilum* in the form of a bacterial consortium, which was inoculated in a mineral medium, using medium crude oil (22.4 °API) at 1% by volume as the only carbon source. Infrared Spectroscopy (FT-IR) measurements were made at different contact time intervals (7, 14 and 21 days) to identify the groups of degraded hydrocarbons, these being in greater proportion those of the aliphatic hydrocarbon region compared to the aromatics. On the other hand, 21 days after the crude oil degradation test, it was confirmed by gas chromatography (GC-FID) that the bacterial consortium degraded the aliphatic hydrocarbons from C15 to C36. The highest percentage of aliphatic degradation (n-alkanes) were C32 and C36 with 100% and the lowest percentages of degradation were isoprenoid alkanes; Pristano and Fitano with 10% and 4%, respectively. Finally, the bacterial consortium made up of *S. marcescens* and *M. nematophilum* represents a good alternative for the biodegradation of aliphatic hydrocarbons (n-alkanes) present in medium crude oil, which is representative of the Mexican mixture that is exploited and produced in the Sound of Campeche, México.

## Biodegradation, Aliphatic hydrocarbons, Crude oil, Spectroscopy, Chromatography

### 1. Introducción

La Sonda de Campeche, representa la mayor fuente de recursos económicos para México. En esta región del suroeste, se genera la mayor explotación y producción de petróleo crudo y gas, pero también es la que más derrames de petróleo ha presentado (55.86 mlbs) en un periodo comprendido de 2006 al 2013 (PEMEX 2014).

Por ello, la Sonda de Campeche y la Laguna de Términos en particular están expuestas y en condición de riesgo ante cualquier contingencia que se pueda presentar por derrames o accidentes originados en instalaciones petroleras durante las actividades de explotación, producción, comercialización o distribución de petróleo y sus derivados (PEMEX 2002).

Por otra parte, el petróleo puede ingresar al ambiente de manera natural a través de afloramientos naturales, mejor conocidos como chapopoteras o por derrames y accidentes ocasionados por el hombre, lo cual es tal vez, una de las causas más frecuentes, junto con los fondos de tanque (Gonzales & Pucci, 2022). En el Golfo de México y Sonda de Campeche se derramaron 560 millones de litros de crudo, por el pozo exploratorio IXTOC I en el año de 1979, contaminando las costas de Campeche, Veracruz y otros estados; actualmente y a pesar de que han transcurrido más de 40 años del accidente del pozo IXTOC I, se han encontrado restos del petróleo derramado en las costas de Campeche (Atlas 1981; Botello et al. 1996; Alpuche-Gual & Gold-Bouchot, 2014).

Durante el derrame de 636 millones de litros ocurrido en el 2010 en las aguas profundas del norte del Golfo de México por la plataforma Deepwater Horizon, se aplicaron alrededor de 6.6 millones de litros de dispersantes químicos para mitigar la contaminación del petróleo. No obstante, debido a que estos compuestos están formulados con detergentes como es el propanol, el cual incrementa la toxicidad del petróleo en los organismos marinos; además tener un efecto letal en las comunidades microbianas (Mascarelli, 2010).

Los riesgos asociados con las actividades desarrolladas por la industria petrolera adquieren atención especial, ya que el petróleo y sus derivados representan una amenaza para la flora y fauna, así como a la salud humana; debido a la naturaleza carcinogénica y recalitrante de hidrocarburos alifáticos y aromáticos presentes en el mismo, los cuales son bioacumulables (Hidayat & Tachibana, 2012). Por tanto, es necesario el desarrollo de alternativas de control de bajo costo y más eficaces que contribuyan a reducir el impacto negativo al ambiente, y con mayor potencial para la degradación de petróleo crudo (Xuliang Zhuang et al., 2022; Novoa García, 2022).

La biorremediación de petróleo mediante consorcios bacterianos es considerada una técnica económica y eficaz comparada con las técnicas físicas y químicas actuales (Salleh et al., 2003; Das & Chandran, 2011).

Ramirez-Elías y colaboradores (2014) reportaron que *Serratia marcescens* y *Microbacterium nematophilum* son bacterias degradadoras de petróleo y que ambas se encontraron presentes en la rizósfera de manglares; así mismo, reportaron que *S. marcescens* es una bacteria Gram negativa presente en ambientes costeros y pertenece al phylum Proteobacterias, mientras que la bacteria *M. nematophilum* pertenece al phylum Actinobacteria. Por ello, el consorcio bacteriano aplicado en el presente estudio representa una alternativa importante para mejorar la biorremediación de petróleo crudo.

Con el desarrollo del presente trabajo se generará información importante respecto a una alternativa para biodegradar hidrocarburos alifáticos de petróleo crudo (22.4 °API), representativo de la mezcla mexicana que se produce en la Sonda de Campeche, México. Por lo anterior, el objetivo principal de este trabajo fue determinar el porcentaje de degradación de hidrocarburos alifáticos (*n*-alcanos) de petróleo crudo medio utilizando un consorcio bacteriano conformado por las bacterias: *Serratia marcescens* y *Microbacterium nematophilum*.

## 2. Descripción del método

### 2.1 Crecimiento bacteriano durante los ensayos de biodegradación de petróleo crudo

Las bacterias utilizadas en este trabajo fueron seleccionadas de un cepario de bacterias aisladas de la rizósfera de manglares de la Laguna de Términos (Ramírez-Elías, 2015). Se seleccionaron y utilizaron las cepas con mayor capacidad de tolerar y crecer en petróleo crudo como es el caso de *Serratia marcescens* (No. de acceso en Genbank: KF921611) y *Microbacterium Nematophilum* (No. de acceso en Genbank: KF921619). Se reactivaron y/o resembraron cada una de ellas por separado en cajas Petri con Agar Nutritivo (Merck®) para su posterior uso, en ensayos de degradación de hidrocarburos de petróleo crudo. El consorcio bacteriano se conformó con la combinación de dichas cepas bacterianas (*S. marcescens* y *M. nematophilum*).

Se preparó el medio mineral (MM) a partir de una solución con 0.4 g  $K_2HPO_4$ , 0.1 g  $KH_2PO_4$ , 0.05 g NaCl, 0.014 g  $NaF_2$  EDTA, 0.0125 g  $Na_2MoO_4$  y 450 mL de agua destilada (solución A); y una solución con 0.1 g  $MgSO_4 \cdot 7 H_2O$ , 0.03 g  $CaCl_2$  y 50 mL de agua destilada (solución B). Se ajustó el pH a 7 y se esterilizaron por separado las soluciones A y B durante 15 min a  $15 \text{ lb} \cdot \text{plg}^{-2}$ . Se enfriaron y ambas soluciones se homogenizaron en condiciones estériles. Se preparó la solución bacteriana (SB) tomando una azada de cada bacteria seleccionada y se disolvió en un tubo de dilución con agua destilada estéril, de la cual se tomaron 3 mL del consorcio bacteriano para inocularlos en cada unidad experimental (UE) y realizar las pruebas de degradación de petróleo crudo (Ramírez-Elías et al., 2014). Las UE se prepararon colocando 500  $\mu\text{L}$  de petróleo crudo (22.4 °API), 50 mL de MM y 3 mL de SB en matraces Erlenmeyer de 250 mL. Posteriormente, las UE por triplicado se incubaron durante los respectivos periodos de tiempo siguientes: 7, 14 y 21 días, a  $28 \text{ }^\circ\text{C} \pm 1$  y 180 rpm en un agitador (modelo CVP-2000P). Transcurrido el tiempo de los ensayos, se realizó la cuantificación de  $\text{UFC} \cdot \text{mL}^{-1}$  promedio del consorcio bacteriano, utilizando la técnica de dilución seriada y rastrilleo en placa.

## 2.2 Método de extracción y purificación de hidrocarburos

Se empleó una extracción líquido-líquido utilizando diclorometano grado cromatográfico como disolvente principal (Carmo et al., 2011). Después de cada ensayo de biodegradación; la muestra se depositó en embudo de separación, se le agregaron 50 mL de diclorometano, se agitó durante tres minutos, y se dejó reposar 10 min. Transcurrido el tiempo de reposo, el extracto orgánico se recuperó en matraz balón de fondo plano y se reconcentró el extracto mediante baño maría, hasta un volumen de aproximadamente 5 mL. La fase orgánica se purificó en un embudo de separación empacado con lana de vidrio agregando 4 g de sulfato de sodio anhidrido, 4 g de gel de sílice y 4 g de sulfato de sodio anhidrido. Los extractos puros, se reconcentraron en un rotavapor (Hahnshin Scientific Co. Modelo: HS-2001NS), hasta un volumen aproximado de 2 mL y se depositaron en viales color ámbar para su conservación y posterior cuantificación por espectroscopia (FT-IR) y cromatografía de gases (GC-FID).

## 2.3 Análisis mediante espectroscopia de infrarrojo (FT-IR)

Se analizaron las muestras de petróleo crudo (22.4 °API) mediante un espectrómetro con infrarrojo medio, modelo Cary 600, Marca Agilent Technology, equipado con un ATR con punta de diamante de reflexión atenuada total, modelo Gladi de Pike Technologies. Para el análisis del petróleo crudo y de las muestras de crudo parcialmente degradadas, se colocaron 0.3 mL de alícuota sobre la superficie del diamante del ATR a una temperatura controlada de  $24 \pm 1$  °C; se obtuvieron los espectros realizando ocho escaneos a una resolución de  $2 \text{ cm}^{-1}$  en un rango entre  $4000\text{-}400 \text{ cm}^{-1}$ ; después de cada medición, se limpió la superficie del cristal del ATR con acetona y papel absorbente. Los datos de los espectros se exportaron a Excel V. 13 de Microsoft para su análisis.

## 2.4 Porcentaje de biodegradación de hidrocarburos alifáticos (n-alcenos) de petróleo crudo mediante Cromatografía de Gases (GC-FID)

El porcentaje de hidrocarburos alifáticos residuales a los 21 días del ensayo se determinó mediante un cromatógrafo de gases con las siguientes especificaciones técnicas: modelo 6890N (Net Work GC system), marca Agilent Technologies, equipado con un detector de ionización de flama (FID) y una columna DB5, 5%-fenil- metilpolisiloxano de 60 m de longitud, 0.25 mm de diámetro interno y  $0.25 \mu\text{m}$  de espesor de película. La temperatura de inicio fue de 50°C durante 5 min, posteriormente la temperatura se elevó hasta 280 °C usando una rampa de calentamiento de  $20 \text{ °C min}^{-1}$ , utilizando Helio como gas acarreador con un flujo de  $1 \text{ mLmin}^{-1}$ . La temperatura del inyector fue de 250 °C, con inyección Split y una relación de Split de 50:1. Se utilizó como estándar de calibración una mezcla de alcanos (100 mg/L en  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , C8 – C40) marca Supelco.

Para conocer las concentraciones residuales de los hidrocarburos alifáticos, se determinaron los tiempos de retención y las áreas bajo la curva de las muestras degradadas y del estándar aplicado. Con las áreas bajo las curvas, generadas en el Cromatógrafo de Gases, se programaron y calcularon los porcentajes de degradación de hidrocarburos alifáticos, utilizando una hoja de Excel 2017 de Microsoft-Windows, aplicando la ecuación 1.

$$\% \text{ Degradación} = \frac{A_0 - A_t}{A_0} * 100 \quad (1)$$

Donde:

$A_0$  : Es el área total del testigo en el cromatograma a un tiempo  $t = 0$  (Hidrocarburo sin degradar).

$A_t$  : Es el área total de petróleo degradado en un tiempo  $t$  (Hidrocarburo degradado).

## 2.5 Análisis estadístico

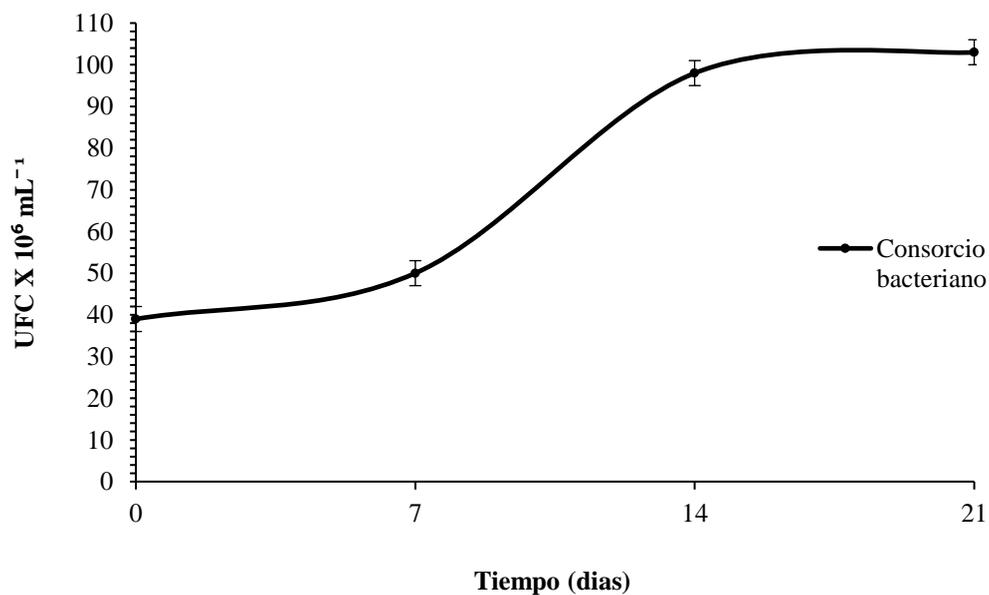
Se calcularon la media y el error estándar de tres réplicas. Los valores medios de UFC del consorcio bacteriano y los porcentajes de degradación se compararon mediante un análisis de ANOVA con un nivel de significancia del 95%. Los análisis estadísticos se realizaron utilizando el software estadístico Infostat (Di Rienzo et al., 2017).

### 3. Resultados

#### 3.1 Crecimiento del consorcio bacteriano durante la degradación de hidrocarburos alifáticos (*n*-alcanos) de petróleo crudo medio.

El gráfico 1, muestra la curva de crecimiento del consorcio bacteriano, se puede observar en primera instancia que el periodo de latencia en el día siete alcanza apenas  $50 \times 10^6$  UFC mL<sup>-1</sup>, lo anterior es debido a su exposición inicial a las altas concentraciones de hidrocarburos de petróleo crudo formados por compuestos lipofílicos, los cuales inhiben el desarrollo microbiano produciendo intoxicación (LaGrega et al., 1996) e inducen en las bacterias una respuesta de “stress” y cambios celulares a nivel de la membrana, enzimas y proteínas (Sikkema et al., 1995). Durante esta fase, se presenta el fenómeno de lisis, según en el cual los nutrientes que quedan en las células muertas se difunden en el medio, proporcionando alimento a las células vivas existentes (García, 2012). Entre 7 y 14 días, se observa un crecimiento más significativo, alcanzando un valor de  $98 \times 10^6$  UFC mL<sup>-1</sup> en el día 14, mientras en el periodo de 14 a 21 días, se tiene un crecimiento mínimo, con un valor máximo de  $103 \times 10^6$  UFC mL<sup>-1</sup> en el día 21.

**Gráfico 1** Curva de crecimiento del consorcio bacteriano (*S. marcescens* y *M. nematophilum*) durante el ensayo de degradación de hidrocarburos de petróleo crudo medio

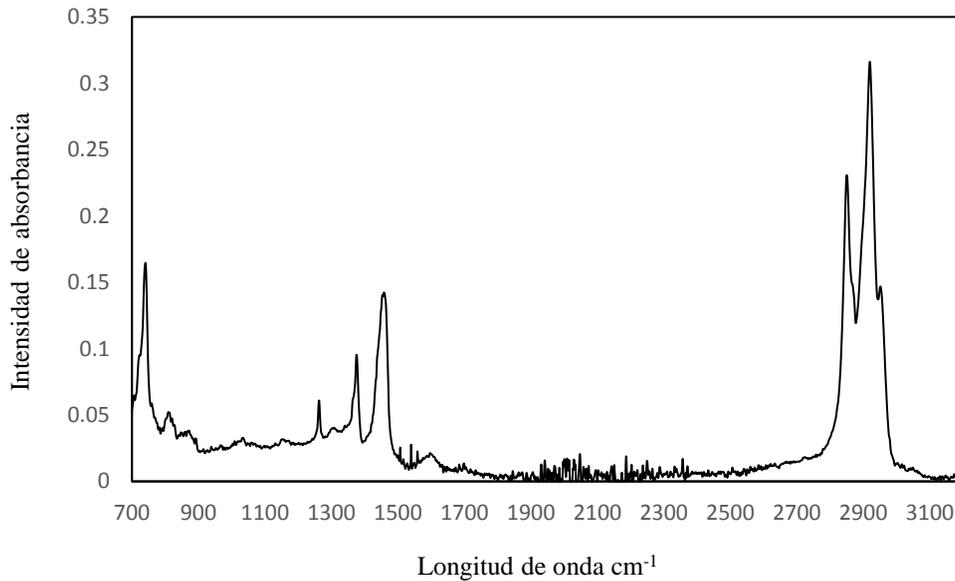


Fuente: Elaboración Propia

#### 3.2 Caracterización de la degradación de hidrocarburos de petróleo crudo por espectroscopia de infrarrojo (FT- IR)

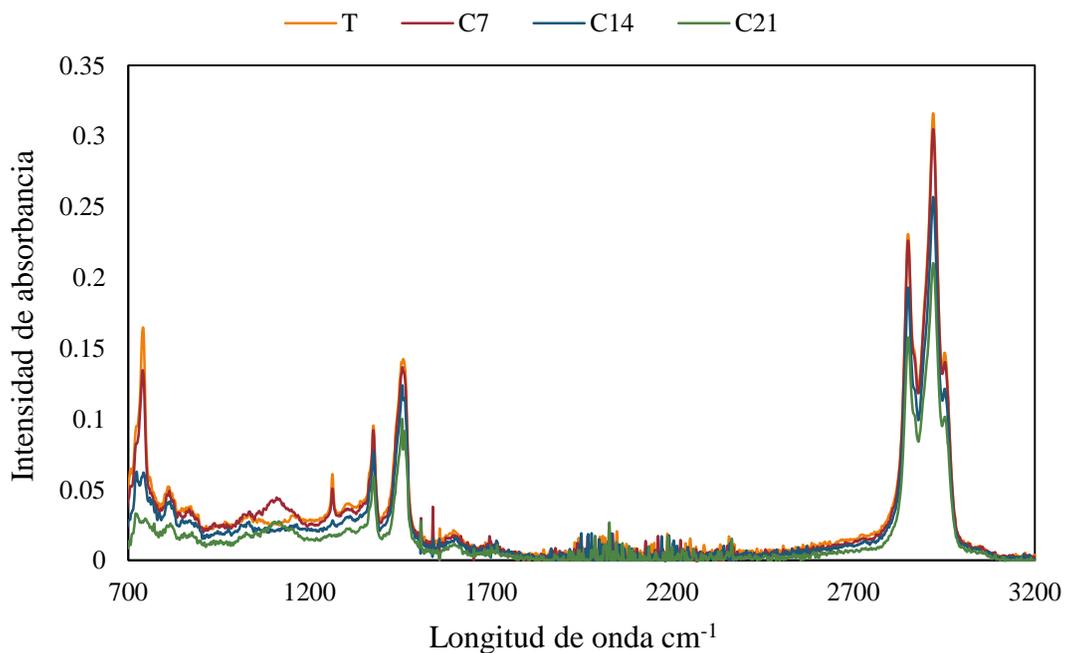
Mediante espectroscopia de infrarrojo, se caracterizó el petróleo (22.4 °API) antes y durante el periodo del proceso de degradación de hidrocarburos (entre 0-21 días) en medio mineral con el fin de estudiar los cambios en su estructura química. El espectro de infrarrojo (**Gráfico 2**) muestra que el crudo sin degradar (testigo) presenta varias bandas de absorbancias. En esta figura, el pico de absorbancia en  $2953$  cm<sup>-1</sup>, la banda de absorbancia entre  $1650$ - $1600$  cm<sup>-1</sup> y los picos de absorbancia entre  $874$ - $710$  cm<sup>-1</sup> corresponden a las vibraciones de estiramiento fuera del plano de enlaces C-H y C=C presentes en hidrocarburos alifáticos y en compuestos aromáticos complejos como asfáltenos y resinas (Castro & Vázquez, 2009).

Se presentaron cuatro picos de absorbancia intensos a  $2918$  y  $2852$  cm<sup>-1</sup>,  $1460$  cm<sup>-1</sup> y  $1376$  cm<sup>-1</sup> los cuales están relacionados con vibraciones de estiramiento simétrico y de flexión asimétrico de los grupos funcionales -CH<sub>2</sub>- y -CH<sub>3</sub> (González et al., 2006; Meléndez et al., 2012). La banda de absorbancia de baja frecuencia entre  $1650$ - $1600$  cm<sup>-1</sup> se atribuyen a vibraciones de estiramiento de enlaces conjugados C=C presentes en los hidrocarburos alifáticos, y a enlaces C=C presentes en compuestos aromáticos (Gabrienko et al., 2014).

**Gráfico 2** Espectro de infrarrojo de petróleo crudo medio sin degradar usado como testigo (T)

*Fuente: Elaboración Propia*

Las huellas espectrales de infrarrojo (Gráfico 3), muestran que el consorcio bacteriano presenta capacidad para degradar hidrocarburos alifáticos y aromáticos presentes en el crudo. Los picos de absorbancia a 2918, 2852, 1460 y 1376  $\text{cm}^{-1}$  disminuyen progresivamente durante el proceso de degradación para 7, 14 y 21 días. Lo que indica que el crudo presenta cambios en su estructura molecular debido al rompimiento de los enlaces  $-\text{CH}_2-$  y  $-\text{CH}_3$  presentes en los hidrocarburos alifáticos. Asimismo, la disminución de los picos de absorbancia a 2953  $\text{cm}^{-1}$ , junto con la banda de absorbancia entre 1650-1600  $\text{cm}^{-1}$  y los picos de absorbancia entre 874-710  $\text{cm}^{-1}$  muestran también rompimientos de los enlaces insaturados cis y trans ( $\text{C}=\text{C}$ ) presentes en los hidrocarburos alifáticos y en los anillos aromáticos, así como rompimientos de enlaces carbono-hidrogeno C-H presentes en los compuestos poliaromáticos. También se puede apreciar en las Figuras 3, el efecto que tiene el consorcio bacteriano en la degradación del crudo en las variaciones de las bandas de absorbancia en el espectro de infrarrojo medio. Cabe señalar que la disminución en la intensidad de las bandas detectadas por espectrometría infrarroja (Absorbancia) se tomó como un indicador en la biodegradación de hidrocarburos de petróleo crudo medio, realizada por el consorcio bacteriano.

**Gráfico 3.** Huellas espectrales de infrarrojo de petróleo crudo medio (T), durante 7, 14 y 21 días

*Fuente: Elaboración Propia*

### 3.3. Porcentaje de biodegradación de hidrocarburos alifáticos (n-alcenos) de petróleo crudo mediante Cromatografía de Gases

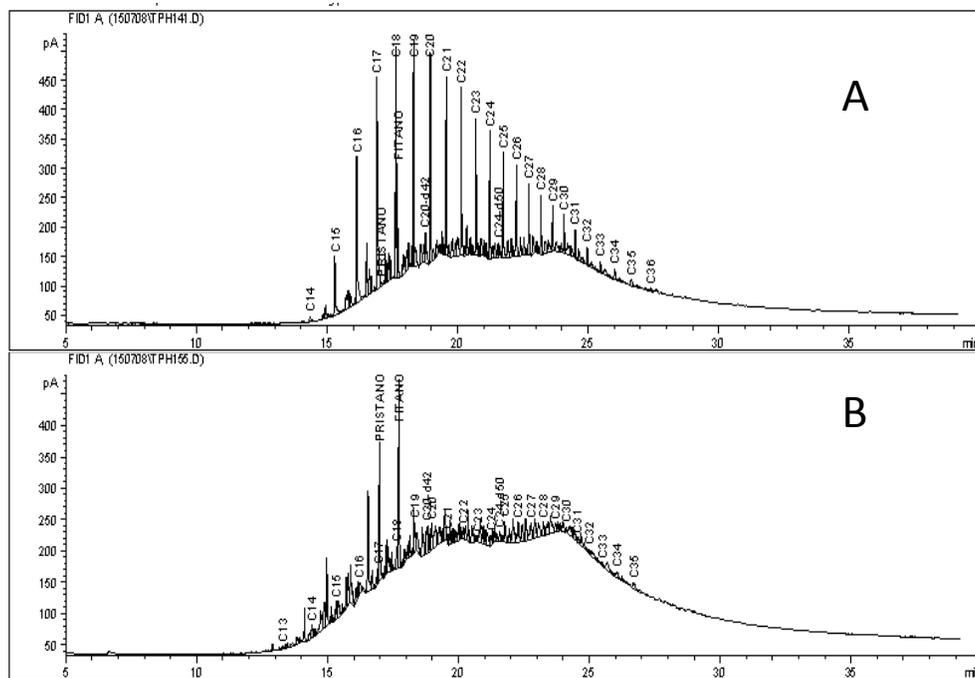
Por medio de cromatografía de gases (GC-FID), se determinó con mayor precisión el porcentaje de degradación de hidrocarburos alifáticos (C<sub>15</sub> al C<sub>36</sub>) por parte del consorcio bacteriano aplicado, a los 21 días del ensayo; confirmando con ello, el porcentaje de degradación significativo observado con espectroscopia de infrarrojo (FT-IR).

En el gráfico 4, se muestran y comparan los cromatogramas del testigo y consorcio bacteriano a 21 días del ensayo de degradación de hidrocarburos de petróleo crudo medio. Cabe señalar que en este periodo de tiempo se mostró mayor porcentaje de degradación de hidrocarburos alifáticos, lo cual coincide con la caracterización realizada mediante espectroscopia de infrarrojo. Se puede observar una disminución importante de hidrocarburos alifáticos (*n*-alcenos cadena larga) desde el C<sub>15</sub> al C<sub>36</sub> con excepción de los alcanos isoprenoides; Pristano y el Fitano, por acción del consorcio bacteriano en comparación con el testigo. El porcentaje de degradación promedio de los *n*-alcenos obtenidos con el consorcio bacteriano, fueron del 88% para C<sub>17</sub>, C<sub>18</sub> y C<sub>19</sub>, 95% para el C<sub>20</sub> al C<sub>31</sub> y C<sub>34</sub>, 96% para C<sub>35</sub>, 98% para C<sub>33</sub> y 100% para el C<sub>32</sub> y C<sub>36</sub>, respectivamente. Los compuestos menores al carbono C<sub>14</sub> no fueron detectados en los diversos tratamientos; lo cual, se justifica dado que diferentes autores han señalado que los alifáticos de cadena corta, se volatilizan en las primeras horas después de un derrame o por su propia naturaleza como compuestos orgánicos volátiles (Cookson, 1995).

En el Gráfico 5, se presenta el porcentaje de la remoción de hidrocarburos alifáticos desde el C<sub>15</sub> al C<sub>36</sub>, mostrando altos porcentajes de degradación del consorcio bacteriano a 21 días; donde los porcentajes de degradación mayores al 88 % se presentan desde el C<sub>17</sub> al C<sub>36</sub>.

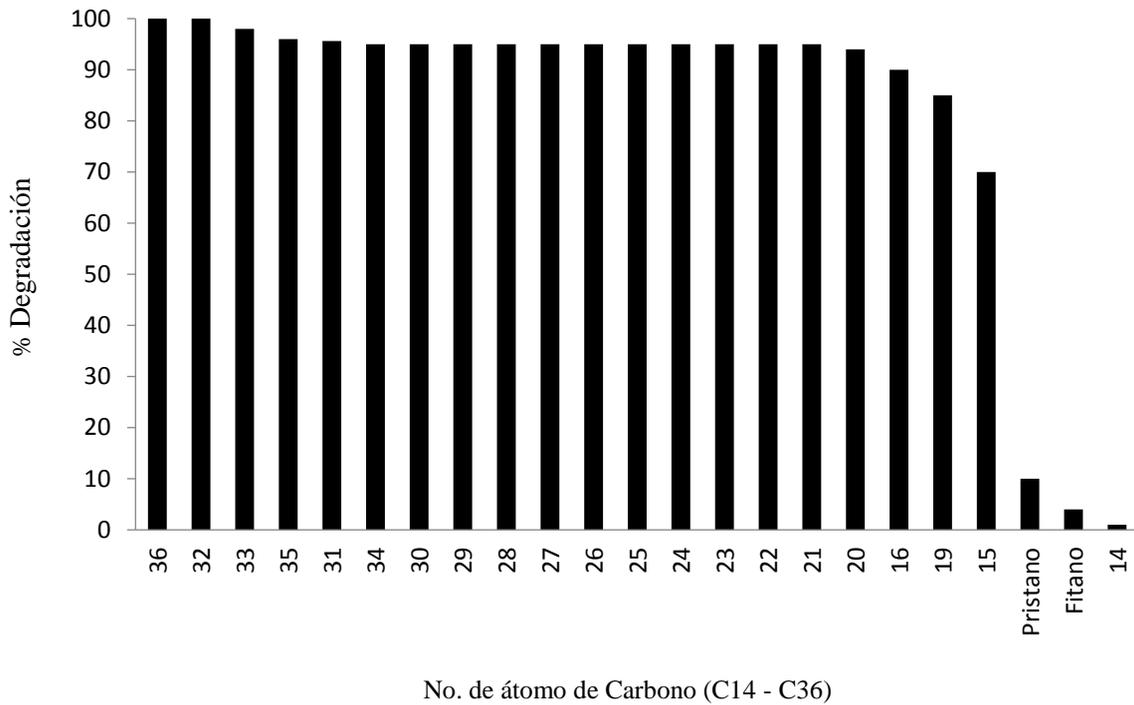
El mayor porcentaje de degradación de alifáticos logrado por el consorcio bacteriano a 21 días, se presentó en el C<sub>32</sub> y C<sub>36</sub> con el 100% y el menor porcentaje de degradación se presentó en el Pristano y Fitano con 10% y 4% respectivamente.

**Gráfico 4** Cromatogramas del ensayo de degradación de hidrocarburos alifáticos (C<sub>14</sub> al C<sub>36</sub>) de petróleo crudo medio a 21 días: A) Testigo. B) Consorcio bacteriano



Fuente: Elaboración Propia

**Gráfico 5** Porcentaje de biodegradación de hidrocarburos alifáticos (C<sub>14</sub> al C<sub>36</sub>) de petróleo crudo medio a 21 días



No. de átomo de Carbono (C14 - C36)

Fuente: *Elaboración Propia*

#### 4. Agradecimiento

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

#### 5. Conclusiones

La espectroscopia de infrarrojo medio (FT-IR) generó información confiable que permite determinar cualitativamente la degradación de hidrocarburos presentes en petróleo crudo.

Mediante la cromatografía de gases (GC-FID), se confirmó que el consorcio bacteriano a 21 días, degradó hidrocarburos desde el C<sub>15</sub> al C<sub>36</sub>, y de forma específica; los porcentajes de degradación de *n*-alcanos más altos fueron el C<sub>32</sub> y C<sub>36</sub> con el 100% y los menores porcentajes de degradación lo presentaron el Prístano y Fitano, con 10% y 4%, respectivamente.

El consorcio bacteriano conformado por *S. marcescens* y *M. nematophilum*, representa una alternativa importante para degradar hidrocarburos alifáticos (*n*-alcanos); así como, para atender problemas de contaminación con petróleo crudo medio en la Sonda de Campeche y/o región del Golfo de México.

## 6. Referencias

- Alpuche-Gual, L. & Gold-Bouchot, G. (2014). Hidrocarburos totales en sedimentos cercanos a plataformas de exploración y de extracción de petróleo en la sonda de Campeche, p. 383-398. En: A.V. Botello, J. Rendón von Osten, J. A. Benítez y G. Gold-Bouchot (eds.). Golfo de México. Contaminación e impacto ambiental: diagnóstico y tendencias. uac, unam icmyl, cinvestav-Unidad Mérida. 1176 p. ISBN 978-607-7887.  
[https://r.search.yahoo.com/\\_ylt=AwrFFBEoupJjvaEC7DLD8Qt.;\\_ylu=Y29sbwNiZjEEcG9zAzQEdnRpZAMEc2VjA3Ny/RV=2/RE=1670589096/RO=10/RU=http%3a%2f%2fepomex.uacam.mx%2f%3fmodulo\\_micrositio%3dpaginas%26acciones\\_micrositio%3ddescargar%26archivo%3dmodulos%2fpaginas%2farchivos%2f14%2fadjuntos%2fGM3TomoII.pdf%26vistafull\\_micrositio%3dyes/RK=2/RS=r4ejj.W6q9pz\\_VhX63vbgGcprOs-](https://r.search.yahoo.com/_ylt=AwrFFBEoupJjvaEC7DLD8Qt.;_ylu=Y29sbwNiZjEEcG9zAzQEdnRpZAMEc2VjA3Ny/RV=2/RE=1670589096/RO=10/RU=http%3a%2f%2fepomex.uacam.mx%2f%3fmodulo_micrositio%3dpaginas%26acciones_micrositio%3ddescargar%26archivo%3dmodulos%2fpaginas%2farchivos%2f14%2fadjuntos%2fGM3TomoII.pdf%26vistafull_micrositio%3dyes/RK=2/RS=r4ejj.W6q9pz_VhX63vbgGcprOs-)
- Atlas, R. M. (1981). Microbial degradation of hydrocarbons: an environmental perspective. *Microbiological Review* 45, 180-209. <https://www.semanticscholar.org/paper/Microbial-degradation-of-petroleum-hydrocarbons%3A-an-Atlas/dfd6b6e9414f9f8793c2282922ba0646e8169b99>  
<https://journals.asm.org/doi/pdf/10.1128/mr.45.1.180-209.1981>
- Botello, A.V., Ponce-Velez, G. & Macko, S. (1996). Niveles de concentración de hidrocarburos en el Golfo de México, p. 225-253. En: A.V. Botello, J.L. Rojas-Galaviz, J.A. Benítez y D. Zárte-Lomelí (Eds.) Golfo de México, Contaminación en Impacto Ambiental: Diagnóstico y Tendencias. EPOMEX Serie Científica 5. Universidad Autónoma de Campeche, México, 666 p.  
[https://scholar.google.com.mx/scholar?hl=es&as\\_sdt=0%2C5&q=Botello%2C+A.V.%2C+Ponce-Velez%2C+G.+y+Macko%2C+S.+%281996%29.+Niveles+de+concentraci%C3%B3n+de+hidrocarburos+en+el+Golfo+de+M%C3%A9xico%2C+p.+225-253.+En%3A+A.V.+Botello%2C+J.L.+Rojas-Galaviz%2C+J.A.+Ben%C3%ADtez+y+D.+Z%C3%A1rate-Lomel%C3%AD+%28Eds.%29+Golfo+de+M%C3%A9xico%2C+Contaminaci%C3%B3n+en+Impacto+Ambiental%3A+Diagn%C3%B3stico+y+Tendencias.+EPOMEX+Serie+Cient%C3%ADfica+5.+Universidad+Aut%C3%B3noma+de+Campeche%2C+M%C3%A9xico%2C+666+p.&btnG=](https://scholar.google.com.mx/scholar?hl=es&as_sdt=0%2C5&q=Botello%2C+A.V.%2C+Ponce-Velez%2C+G.+y+Macko%2C+S.+%281996%29.+Niveles+de+concentraci%C3%B3n+de+hidrocarburos+en+el+Golfo+de+M%C3%A9xico%2C+p.+225-253.+En%3A+A.V.+Botello%2C+J.L.+Rojas-Galaviz%2C+J.A.+Ben%C3%ADtez+y+D.+Z%C3%A1rate-Lomel%C3%AD+%28Eds.%29+Golfo+de+M%C3%A9xico%2C+Contaminaci%C3%B3n+en+Impacto+Ambiental%3A+Diagn%C3%B3stico+y+Tendencias.+EPOMEX+Serie+Cient%C3%ADfica+5.+Universidad+Aut%C3%B3noma+de+Campeche%2C+M%C3%A9xico%2C+666+p.&btnG=)  
<https://doi.org/10.3109/10408417709102810>
- Castro, L. V. & Vázquez, F. (2009). Fractionation and characterization of Mexican crude oils. *Energy & Fuel* 23, 1603-1609.  
[https://www.researchgate.net/publication/231273886\\_Fractionation\\_and\\_Characterization\\_of\\_Mexican\\_Crude\\_Oils](https://www.researchgate.net/publication/231273886_Fractionation_and_Characterization_of_Mexican_Crude_Oils) <https://doi.org/10.1021/ef8008508>
- Carmo, F.L., Fragoso dos santos, H., Ferreira Martins, E., Van Elsas J.D., Soares Rosado, A. & Silva Peixoto, R. (2011). Bacterial structure and characterization of plant growth promoting and oil degrading bacteria from the rhizospheres of mangrove plant. *J. Microbiol.* 49,535-543  
<https://link.springer.com/article/10.1007/s12275-011-0528-0> <https://doi.org/10.1007/s12275-011-0528-0>
- Cookson, J. Jr. (1995). *Bioremediation Engineering: Design and Application*. Mc Graw Hill, New York.  
<https://www.semanticscholar.org/paper/Bioremediation-engineering-%3A-design-and-application-Cookson/20c5f42f8753609c27780821218e3c746b685863> <https://doi.org/10.5860/choice.33-0950>
- Das, N. & Chandran, P. (2011). Microbial degradation of petroleum hydrocarbon contaminants: An Overview. *Biotechnol Reserch Internal* 13. <https://www.hindawi.com/journals/btri/2011/941810/>  
<https://doi.org/10.4061/2011/941810>
- Di Rienzo J.A., Casanoves F., Balzarini M.G., González L., Tablada M. & Robledo C.W. (2017). Software estadístico InfoStat, FCA, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.  
<http://www.infostat.com.ar>
- Gabrienko, A. A., Lai, C. H. & Kazarian, S. G. (2014). In situ chemical imaging of asphaltene precipitation from crude oil induced by *n*-heptane. *Energy & Fuel* 28, 964-971.  
<https://www.semanticscholar.org/paper/In-Situ-Chemical-Imaging-of-Asphaltene-from-Crude-Gabrienko-Lai/9421d62cc9187ef4dd6fc36d61d5770d1c931ed1> <https://doi.org/10.1021/EF402255C>

- García Flores E. R. (2012). Tratamiento por bioaumentación de un agua contaminada con hidrocarburos colectada en un terreno en rehabilitación. Maestría en Ingeniería. Universidad Nacional Autónoma de México. 165 p [https://ru.dgb.unam.mx/handle/DGB\\_UNAM/TES01000681163](https://ru.dgb.unam.mx/handle/DGB_UNAM/TES01000681163)  
<http://132.248.9.195/ptd2012/junio/0681163/Index.html>
- González, G., Sousa M. A. & Lucas, F. E. (2006). Asphaltene precipitation from crude oil and hydrocarbon media. *Energy & Fuel* 20, 2544-2551.  
<https://www.semanticscholar.org/paper/Asphaltene-Precipitation-from-Crude-Oil-and-Media-Gonz%C3%A1lez-Sousa/6f75ce0caf31ed0277a53ff19863a3f98bd7f7b1>  
<https://doi.org/10.1021/EF060220J>
- González, M., & Pucci, G. (2022). Aislamiento de bacterias post tratamiento con gasoil-agua y centrifugación de fondo de tanques petroleros. *Revista peruana de biología*, 29(2).  
<https://revistasinvestigacion.unmsm.edu.pe/index.php/rpb/article/view/21526>  
<https://doi.org/10.15381/rpb.v29i2.21526>
- Hidayat, A. & Tachibana, S. (2012). Biodegradation of Aliphatic Hydrocarbon in Three Types of Crude Oil by *Fusarium* sp. F092 under Stress with Artificial Sea Water. *Journal of Environmental Science and Technology* 5, 64-73. <https://scialert.net/abstract/?doi=jest.2012.64.73>  
<https://dx.doi.org/10.3923/jest.2012.64.73>
- Lagrega, M., Buckingham, P. & Evans, J. (1996). Gestión de Residuos Tóxicos – tratamiento, eliminación y recuperación de suelos. Madrid, España: Mc-Graw Hill/Interamericana de España S. A. <https://www.semanticscholar.org/paper/Gesti%C3%B3n-de-residuos-t%C3%B3xicos%3A-tratamiento%2C-y-de-LaGrega-Buckingham/6e81df335d46661f454f4ae7984a61a6a33ad9ec>
- Mascarelli, A. (2010). Debate grows over impact of dispersed oil. *Nature News*. <https://www.nature.com/articles/news.2010.347#citeas> <https://doi.org/10.1038/news.2010.347>
- Meléndez, L. V., Lache, A., Orrego-Ruiz, J. A., Pachón, Z. & Mejía-Ospino, E. (2012). Prediction of the SARA analysis of Colombian crude oils using ATR-FTIR spectroscopy and chemometric methods. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 90, 56-60.  
<https://www.semanticscholar.org/paper/Prediction-of-the-SARA-analysis-of-Colombian-crude-Melendez-Lache/2c73541ef4b22b5b8e27e9f1dd30ae468e8b9933>  
<https://doi.org/10.1016/J.PETROL.2012.04.016>
- Novoa García, M. F. (2022). Microorganismos como herramienta para minimizar el impacto ambiental por derrame de hidrocarburos. <https://repository.udca.edu.co/handle/11158/4717>  
<https://repository.udca.edu.co/bitstream/handle/11158/4717/1.%20Proyecto%20final%20-%20Novoa%20Mar%c3%ada%20PDF.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- PEMEX (2002). Seguridad, Salud y Medio Ambiente. Protección Ambiental. 12-24. <https://es.scribd.com/document/163432186/PEMEX-Informe-Seguridad-Salud-y-Medio-Ambiente-2002>
- PEMEX (2014). Elementos del plan de negocios de PEMEX y sus organismos subsidiarios 2014-2018. <https://vdocuments.net/plan-de-negocios-de-petroleos-mexicanos-y-sus-organismos-.html?page=22>
- Ramírez-Elías, M. A., Ferrera-Cerrato R., Alarcón, J. J., Almaraz, G., Ramírez Valverde, L. E., de-Bashan, F. J., Esparza-García, O., García-Barradas (2014). Identification of culturable microbial functional groups isolated from the rhizosphere of four species of mangroves and their biotechnological potential, *Applied Soil Ecology*, 82, 1-10, ISSN 0929-1393.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0929139314001395>  
<https://doi.org/10.1016/j.apsoil.2014.05.001>

Ramirez-Elías, M. A. (2015). Degradación de hidrocarburos de petróleo mediante bacterias rizosféricas aisladas de manglares de la Laguna de Términos 115-125. En: Aguilar-Ucán, C.A., Anguebes-Franceschi, F., Carballo-Pat C.G., Cerón-Breton J.G., Cerón-Breton R.M., Montalvo-Romero C., Ramirez-Elias M.A. y Zavala-Loria J.C. (2015). AVANCES EN INGENIERÍA QUÍMICA: medio ambiente, bioenergía y procesos. Universidad Autónoma del Carmen. LyM Editores. Primera edición. Campeche, Mexico.166 p. ISBN978-607-9709-70-9

Salleh, A.B., F.M. Ghazali, R.N.A. Rahman, & M. Basri. (2003). Bioremediation of petroleum hydrocarbon pollution. *Indian Journal of Biotechnology* 2, 411-425. <https://www.semanticscholar.org/paper/Bioremediation-of-Petroleum-Hydrocarbon-Pollution-Salleh-Ghazali/37ffdfb69b2c56c6429b9ffc6b817a89b9226942>  
[http://nopr.niscair.res.in/bitstream/123456789/11330/1/IJBT%20\(3\)%20411-425.pdf](http://nopr.niscair.res.in/bitstream/123456789/11330/1/IJBT%20(3)%20411-425.pdf)

Sikkema, J. Bont, J. A. & Poolman, B. (1995). Mechanisms of membrane toxicity of hydrocarbons. *Microbiological Reviews* 59, 201-222. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/7603409/>  
<https://doi.org/10.1128/mr.59.2.201-222.1995>

Xuliang Zhuang, Yaxin Wang, Haoyu Wang, Yuzhu Dong, Xianglong Li, Shijie Wang, Haonan Fan, Shanghua Wu. (2022). Comparison of the efficiency and microbial mechanisms of chemical and bio-surfactants in remediation of petroleum hydrocarbon, *Environmental Pollution*, Vol. 314. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0269749122014129?via%3Dihub>  
<https://doi.org/10.1016/j.envpol.2022.120198>

## **Instrucciones para Publicación Científica, Tecnológica y de Innovación**

---

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

Apellidos (EN MAYUSCULAS), Nombre del 1<sup>er</sup> Autor†\*, Apellidos (EN MAYUSCULAS), Nombre del 1<sup>er</sup> Coautor, Apellidos (EN MAYUSCULAS), Nombre del 2<sup>do</sup> Coautor y Apellidos (EN MAYUSCULAS), Nombre del 3<sup>er</sup> Coautor

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

*International Identification of Science - Technology and Innovation*

ID 1<sup>st</sup> author: (ORC ID - Researcher ID Thomson, arXiv Author ID - PubMed Author ID - Open ID) and CVU 1<sup>st</sup> author: (Scholar-PNPC or SNI-CONACYT) (No.10 Times New Roman)

ID 1<sup>st</sup> coauthor: (ORC ID - Researcher ID Thomson, arXiv Author ID - PubMed Author ID - Open ID) and CVU 1<sup>st</sup> coauthor: (Scholar or SNI) (No.10 Times New Roman)

ID 2<sup>nd</sup> coauthor: (ORC ID - Researcher ID Thomson, arXiv Author ID - PubMed Author ID - Open ID) and CVU 2<sup>nd</sup> coauthor: (Scholar or SNI) (No.10 Times New Roman)

ID 3<sup>rd</sup> coauthor: (ORC ID - Researcher ID Thomson, arXiv Author ID - PubMed Author ID - Open ID) and CVU 3<sup>rd</sup> coauthor: (Scholar or SNI) (No.10 Times New Roman)

(Report Submission Date: Month, Day, and Year); Accepted (Insert date of Acceptance: Use Only ECORFAN)

**Citación:** Primer letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre del 1<sup>er</sup> Autor. Apellido, Primer letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre del 1<sup>er</sup> Coautor. Apellido, Primer letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre del 2<sup>do</sup> Coautor. Apellido, Primer letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre del 3<sup>er</sup> Coautor. Apellido

Correo institucional [Times New Roman No.10]

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

# Instrucciones para Publicación Científica, Tecnológica y de Innovación

---

## Abstract

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

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

## 1 Introducción

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

Explicación del tema en general y explicar porque es importante.

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

Enfocar claramente cada una de sus características.

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

Explicación de las secciones del Capítulo.

## Desarrollo de Secciones y Apartados del Capítulo con numeración subsecuente

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

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

## Inclusión de Gráficos, Figuras y Tablas-Editables

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

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

**Tabla 1.1** Título

<b>Particiones</b>	<b>Valores</b>	<b>Log</b>
P1	7.58	0.88
P2	7.62	0.88
P3	7.58	0.88
P4	7.59	0.88
P5	7.57	0.88
P6	7.58	0.88
P7	7.57	0.88

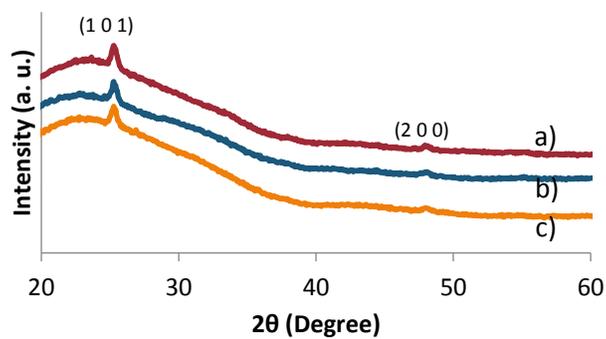
Fuente de Consulta:  
(No deberán ser imágenes, todo debe ser editable)

Figura 1.1 Título



Fuente de Consulta:  
(No deberán ser imágenes, todo debe ser editable)

Gráfico 1.1 Título



Fuente de Consulta:  
(No deberán ser imágenes, todo debe ser editable)

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

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

$$P = \frac{[V_V - P_V]^{1/2}}{V_O - P^{Uh}} + \frac{3}{4} \left[ \frac{(P^{VL})}{(P_u)} \right] \rightarrow \int_{V^{La}}^{U_a} \quad (1)$$

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

### Metodología a desarrollar

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

### Resultados

Los resultados deberán ser por sección del Capítulo.

### Anexos

Tablas y fuentes adecuadas.

### Agradecimiento

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

# Instrucciones para Publicación Científica, Tecnológica y de Innovación

---

## Conclusiones

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

## Referencias

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

## Ficha Técnica

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

Nombre del Handbook

Título del Capítulo

Abstract

Keywords

Secciones del Capítulo, por ejemplo:

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

Nombre de Autor (es)

Correo Electrónico de Correspondencia al Autor

Referencias

## Requerimientos de Propiedad Intelectual para su edición:

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

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

-Firma Autógrafa en Color Azul del Formato de Conflicto de Intereses del Autor y Coautores.

## **Reserva a la Política Editorial**

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

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

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

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

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

Título de la Obra Científica:

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

## Copyright y Acceso

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

Título de la Obra Científica:

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

## Principios de Ética y Declaratoria de Solución a Conflictos Editoriales

### Responsabilidades del Editor

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

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

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

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

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

### Responsabilidades del Consejo Editorial

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

### Responsabilidades del Comité Arbitral

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

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

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

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

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

### **Responsabilidades de los Autores**

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

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

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

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

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

### **Servicios de Información**

#### **Indización - Bases y Repositorios**

RESEARCH GATE	For international bibliographer's manager
MENDELEY	For basification of data from scientific journals
GOOGLE SCHOLAR	For your international search specialized in retrieving scientific documents
REDIB	Ibero-American Network of Innovation and scientific knowledge-CSIC

#### **Servicios Editoriales:**

Identificación de Citación e Índice H.  
Administración del Formato de Originalidad y Autorización.  
Testeo del Chapter con PLAGSCAN.  
Evaluación de Obra Científica.  
Emisión de Certificado de Arbitraje.  
Edición de Obra Científica.  
Maquetación Web.  
Indización y Repositorio  
Publicación de Obra Científica.  
Certificado de Obra Científica.  
Facturación por Servicio de Edición.

#### **Política Editorial y Administración**

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

**ECORFAN®**

**Editor en Jefe**

VARGAS-DELGADO, Oscar. PhD

**Directora Ejecutiva**

RAMOS-ESCAMILLA, María. PhD

**Director Editorial**

PERALTA-CASTRO, Enrique. MsC

**Diseñador Web**

ESCAMILLA-BOUCHAN, Imelda. PhD

**Diagramador Web**

LUNA-SOTO, Vladimir. PhD

**Asistentes Editoriales**

SORIANO-VELASCO, Jesus. BsC

**Filóloga**

RAMOS-ARANCIBIA, Alejandra. BsC

**Publicidad y Patrocinio**

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

**Oficinas de Gestión**

143 - 50 Itzopan, Ecatepec de Morelos–México.

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

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

18 Marcial Romero, CP-241550. Avenue, Salinas 1 - Santa Elena-Ecuador.

1047 La Raza Avenue -Santa Ana, Cusco-Peru.

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

Southwest Avenue, San Sebastian – León-Nicaragua.

6593 Kinshasa 31 – Republique Démocratique du Congo.

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

16 Kilometro, American Highway, House Terra Alta, D7 Mixco Zona 1-Guatemala.

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

Distrito YongHe, Zhongxin, calle 69. Taipei-Taiwán.

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



9 7 8 6 0 7 8 6 9 5 9 4 2

ISBN 978-607-8695-94-2



[www.ecorfan.org](http://www.ecorfan.org)