



ABSTRACTS

S9. Investigación y formación en posgrados del CUCEI

S9. Investigación y formación en posgrados del CUCEI

Symposium Organizers:

Rubén González Núñez UdeG
Martín Arellano Martínez UdeG

S9-abs001

INFLUENCIA ESTRUCTURAL EN PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO EN DETECCIÓN DE CATIONES DEL GRUPO 2

Noe Castañeda Morones¹, Jesus Lara¹

¹Universidad de Guadalajara, Química, Mexico.

En este estudio teórico se analizó una serie de puntos cuánticos de carbono (CDs) derivados del pireno, funcionalizados con un fragmento quiral de L-cisteína, con el objetivo de evaluar su aplicación potencial como sensores selectivos para cationes metálicos del grupo 2⁺ (Be²⁺, Mg²⁺ y Ca²⁺)¹. Se consideraron dos configuraciones estructurales que difieren en la posición del fragmento quiral sobre el núcleo aromático, ya que dicha posición influye significativamente en la distribución electrónica y en la reactividad del sistema². Para cada configuración, se identificaron dos regiones diferenciadas para la interacción con los cationes: una asociada al fragmento quiral y otra centrada exclusivamente en el sistema aromático del pireno. Estas regiones se definieron a partir del análisis de funciones de Fukui, seleccionando los sitios con mayor carácter nucleofílico como candidatos a formar complejos estables con los cationes. Previo a las simulaciones de interacción con los metales, se realizó una caracterización detallada de la reactividad global y local de cada sistema mediante teoría del funcional de la densidad (DFT)², con el fin de comprender su potencial como plataforma sensora. Los resultados permiten establecer relaciones entre la posición del grupo quiral, la densidad electrónica localizada y la capacidad de estabilizar iones metálicos, aportando elementos clave para el diseño racional de sensores moleculares basados en CDs quirales.

Keywords: Puntos cuánticos de carbono, Cationes divalentes, Detección

Presenting author's email: noe.castaneda7459@alumnos.udg.mx

S9-abs004

Influencia del factor humano en morteros cemento–arena (1:3) con adición de cal: efectos en masa, densidad y resistencia

Jahaziel Méndez García¹, Erick Omar Cisneros López², Francisco José Aranda García¹, José Antonio Muñoz Gómez¹

¹Universidad de Guadalajara, Ingenierías, Mexico. ²Universidad de Guadalajara, Física, Mexico.

Este estudio evalúa la influencia del factor humano en morteros cemento–arena (1:3) con adición de cal equivalente a un tercio de la masa de cemento, manteniendo fija la formulación y el contenido de agua. Se

elaboraron lotes por distintos operadores bajo el mismo protocolo de mezclado y curado, registrándose la masa de mezcla, la densidad de las muestras y la resistencia a compresión.

Los resultados muestran una dispersión apreciable en la masa inicial y una distribución irregular de densidades, consistente con variaciones en el mezclado, la compactación y la distribución del agregado. La resistencia a compresión osciló entre 7–10 MPa sin tendencia clara entre lotes, con variaciones del orden de $\pm 15\%$ atribuibles al procedimiento dependiente del operador.

Aun con dicha variabilidad, los morteros alcanzaron la resistencia mínima de 7 MPa para uso estructural. Se concluye que el factor humano introduce una variabilidad no despreciable en propiedades clave; la estandarización es necesaria.

Keywords: mortero 1:3, resistencia a compresión, variabilidad

Presenting author's email: jahazielm@gmail.com

S9-abs005

COMPARISON OF L-ASCORBIC ACID AND OXALIC ACID DIHYDRATE AS CHEMICAL REDUCERS IN THE SYNTHESIS OF GOLD NANOPARTICLES STABILIZED WITH TANNIC ACID IN THE DEEP EUTECTIC SOLVENT OF CHOLINE CHLORIDE-UREA

Edwin Yered de Anda Lomelí¹, Alejandro Aguilar Ramírez¹, Josue Mota-Morales², Silvia Teresa Huerta Marcial³, Emma Rebeca Macias Balleza¹, Raul Ortega-Cordova⁴

¹Universidad de Guadalajara, Ingeniería Química, Mexico. ²Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Nanotecnología, Mexico. ³Universidad de Guadalajara, Mecánica Eléctrica, Mexico. ⁴Universidad de Guadalajara, Química, Mexico.

Chemical reduction is a method of synthesizing metal nanoparticles using a bottom-up mechanism. Various chemical compounds have been used as chemical reducing agents, such as trisodium citrate, sodium borohydride (NaBH₄), squaric acid, oxalic acid, among others. Some syntheses are stabilized or controlled by adding polymers or other compounds, such as surfactants. The above examples were carried out in aqueous media. Currently, the synthesis of AuNPs in other, more environmentally friendly solvents such as DES has been explored.

DES (Deep Eutectic Solvents) are a type of solvent that are mostly biodegradable, making them an ecological and economical alternative. In addition, they are relatively inexpensive. These solvents are eutectic mixtures with hydrogen bond donors (HBD) and hydrogen bond acceptors (HAB).

This research contributes to the study of the control of tannic acid-stabilized gold nanoparticle synthesis and the exploration of L-ascorbic and oxalic dihydrate acids as chemical reducing agents in DES formed by choline chloride and urea. The nanoparticles were characterized by UV-vis, SEM/TEM, and light scattering.

Keywords: DES, Gold nanoparticles, Tannic acid

Presenting author's email: alejandro.aguilar3703@alumnos.udg.mx

S9-abs006

PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE BIOCOMPOSITOS OLEFÍNICOS Y BIODEGRADABLES CON LUFFA CILÍNDRICA POR MOLDEO ROTACIONAL

Pedro Daniel Gonzalez Gonzalez¹, Ruben Gonzalez Nuñez¹

¹Universidad de Guadalajara, Ingeniería Química, Mexico.

Los biocompositos reforzados con fibras naturales representan una alternativa sostenible frente a los materiales convencionales, ya que permiten mejorar propiedades mecánicas y térmicas al tiempo que reducen el impacto ambiental. En este estudio se empleó polvo de *Luffa cylindrica aegyptiaca* con tamaño de malla 50 (Tyler) como refuerzo natural para la elaboración de biocompositos mediante la técnica de moldeo rotacional. Se desarrollaron dos tipos de matrices: una olefínica, a base de polietileno, y otra biodegradable, compuesta por una mezcla de 20% de policaprolactona (PCL) y 80% de ácido poliláctico (PLA). Los materiales obtenidos fueron caracterizados en cuanto a sus propiedades térmicas, morfológicas y mecánicas. Los resultados muestran que la incorporación del polvo de luffa mejora la compatibilidad entre los componentes y contribuye al aumento de la resistencia mecánica del material, así como a una mejor estabilidad térmica, lo que demuestra el potencial de esta fibra vegetal como refuerzo en sistemas poliméricos sostenibles procesados por moldeo rotacional. El LMDPE RO93650 fue suministrado por Polímeros Nacionales (México). Este polímero presenta un índice de fluidez (MFI) de 5.0 g/10 min (190°C, 2.16kg) y una densidad de 0.936g/cm³. La fibra de *Luffa cylindrica* fue adquirida en Ciudad Guzmán, Jalisco, México. Su preparación se muestra en la Figura 1. Parte de la fibra fue pulverizada utilizando un molino PULVEX 200; posteriormente, el material se tamizó mediante un tamiz Rotap, modelo RX-30 (Ohio, EE.UU.), utilizando la serie de malla Tyler: 50. El poli(ácido láctico) (PLA) 2003D de Nature Works con índice de fluidez (MFI) de 6.0 g/10 min (210 °C, 2.16 kg), la policaprolactona (PCL) 6800 de Ingevity con índice de fluidez (MFI) de 2.01-4.03 g/10 min (160 °C, 2.16 kg) y la *Luffa cylindrica* con densidad de 1.543 g/cm³ adquirida vía Mercado Libre. La incorporación de un 10% de fibra de luffa tratada con NaOH (TM) en mezclas tipo MELT B. mejora notablemente el desempeño mecánico respecto a la matriz olefínica (LMDPE) y a la biodegradable 20% PCL/80% PLA. En comparación con LMDPE, MELT B. TM muestra incrementos del 269% en módulo de tensión (712 vs. 193 MPa), 185% en módulo de flexión (2304 vs. 807 MPa) y un aumento del 64.7% en resistencia a la tensión (37 vs. 13 MPa), lo que indica una rigidez y resistencia superiores por efecto del refuerzo y la mezcla por fusión. Frente a la matriz biodegradable (20% PCL), MELT B. TM presenta propiedades similares en módulo de tracción (712 vs. 1401 MPa) pero supera ligeramente en tenacidad (40 vs. 36 J/m) y se acerca en módulo a flexión (2304 vs. 2304 MPa), mostrando un balance competitivo entre rigidez y resistencia al impacto. Además, MELT B. TM supera ampliamente a su contraparte DRY B. TM, con mejoras del 38% en módulo de tensión, 129% en módulo de flexión, y 11.1% en resistencia a tracción, lo que confirma que tanto el tratamiento alcalino como el método de procesamiento son determinantes para maximizar la eficiencia del refuerzo con fibra de luffa.

Keywords: Rotomoldeo, Luffa, Biodegradable

Presenting author's email: pedro.gonzalez2888@alumnos.udg.mx

S9-abs007

DEGRADACIÓN DE PHB, PHBV Y PLA Y SU EFECTO EN EL CRECIMIENTO TEMPRANO DE JITOMATE Y LECHUGA

Alfonso Barajas Cervantes¹, Aida Alejandra Pérez-Fonseca¹, Martín Rigoberto Arellano-Martínez¹, Jorge Ramón Robledo-Ortíz¹

¹Universidad de Guadalajara, Ingeniería Química, Mexico.

En el presente trabajo se procesaron por termocompresión placas de polihidroxibutirato (PHB), polihidroxibutirato-co-valerato (PHBV) y poliácido láctico (PLA) los cuales fueron sometidos a degradación en una cámara de intemperismo acelerado por 2 semanas. Se caracterizó la degradación de los biopolímeros por técnicas como colorimetría y ensayos mecánicos de tracción. Además se midió la capacidad de absorción de agua de los biopolímeros así como su biodegradación en compostaje por 60 días. Posteriormente al periodo de biodegradación se monitoreó la composta para observar la presencia de microplásticos. La composta usada en las pruebas de biodegradación fue utilizada como sustrato para el crecimiento de Jitomate saladet (*Solanum lycopersicum*) y lechuga (*Lactuca sativa*). Los resultados de la caracterización después de la exposición a intemperismo muestran un cambio significativo en el color de los biopolímeros lo cual se atribuye a la reconfiguración química de los polímeros para PHB y PHBV y a la recristalización en las cadenas de PLA. Las pruebas mecánicas mostraron que la resistencia a la tensión del PHB disminuye un 15% por la exposición a intemperismo mientras que la del PHBV no es afectada significativamente, en el caso del PLA la propiedad sufrió una disminución de 25%. El análisis de la composta después del periodo de biodegradación del polímero mostró la presencia de partículas plásticas de hasta 0.02 mm recuperados de la composta de PHB, mientras que de la composta del PLA se recuperaron partículas de hasta 0.016 mm. En la evaluación de fitotoxicidad, se midió el crecimiento de las plantas para hacer una comparación con una planta de control (libre de microplásticos) y no se encontró indicio que el polímero biodegradado tenga influencia sobre el crecimiento temprano de jitomate y lechuga.

Keywords: Biopolímeros, Biodegradación, Microplásticos

Presenting author's email: alfonso.bcervantes@alumnos.udg.mx

S9-abs008

SÍNTESIS POR EL MÉTODO SOL – GEL DE UNA SÍLICE FUNCIONALIZADA CON GUANIDINA Y USADA COMO ADSORBENTE PARA LA REMOCIÓN DE MALATIÓN EN SOLUCIONES ACUOSAS

Yoel Alfonso Acosta¹, René Guadalupe Moran Salazar², Jessica Badillo Camacho³, Adriana Macaria Macias Lamas⁴, Sergio Gómez Salazar⁵, José Antonio Gutiérrez Ortega³

¹Universidad de Guadalajara, Departamento de Ingeniería Química, Mexico. ²Universidad de Guadalajara, Química, Mexico. ³Universidad de Guadalajara, Madera, celulosa y papel, Mexico. ⁴Universidad de Guadalajara, Farmacobiología, Mexico. ⁵Universidad de Guadalajara, Ingeniería Química, Mexico.

La producción mundial de alimentos ha aumentado con el crecimiento de la población. Esto ha llevado al uso de pesticidas, como el malatión, en cultivos agrícolas para lograr una producción alimentaria eficiente y mantenerlos libres de plagas de insectos que pueden reducir los rendimientos. Sin embargo, el uso extensivo de malatión genera residuos que se acumulan en cuerpos de agua, representando un riesgo tanto para los ecosistemas acuáticos como para la salud humana debido a su toxicidad. Para abordar este problema, se han empleado múltiples tratamientos, incluyendo la adsorción utilizando adsorbentes de sílice modificados químicamente sintetizados mediante el proceso sol-gel. Este estudio tiene como objetivo evaluar el adsorbente de gel de sílice funcionalizado con guanidina para la eliminación de malatión de medios acuosos. Para este propósito, el adsorbente sintetizado se probó con experimentos de máxima adsorción de malatión a pH 5.7, espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), análisis de adsorción de nitrógeno y titulaciones potenciométricas. Los resultados indicaron una adsorción máxima de malatión de 93,46 mg g⁻¹,

FTIR mostró la funcionalización de la sílice con guanidina, indicando los grupos amino presentes. El adsorbente exhibe isothermas de adsorción de nitrógeno características de los materiales mesoporosos. Las titulaciones potenciométricas revelaron la presencia del grupo amino de la guanidina identificados por su pKa correspondiente. Tras analizar los resultados, se determinó que el adsorbente tiene potencial para la eliminación de malatión en medios acuosos, especialmente en procesos de purificación de agua.

Keywords: Adsorción, Sol - Gel, Guanidina

Presenting author's email: yoel.alfonso2886@alumnos.udg.mx

S9-abs011

MODELADO Y OPTIMIZACIÓN DE DESTILACIÓN MULTICOMPONENTE CON VOLUMEN DE FASES CONSTANTE.

Alejandro Cristopher Nava Téllez¹, Sergio Javier Munguía Medina¹, Juan Paulo García Sandoval¹

¹Universidad de Guadalajara, Ingeniería Química, Mexico.

En este trabajo se presenta un modelado termodinámicamente consistente del proceso de destilación multicomponente, considerando el volumen de fases constante en cada etapa. Se generalizan los balances de moles totales, balances por componente y balances de energía, formulando las matrices de masa para sistemas ideales que cumplen con la ley de Raoult. Las simulaciones implementadas en MATLAB muestran resultados coherentes, con estados estacionarios que convergen a valores cercanos a los obtenidos mediante métodos clásicos como Fenske-Underwood-Gilliland. El objetivo principal es analizar el comportamiento dinámico y optimizar el desempeño energético de una columna de destilación, partiendo de un modelo detallado para mezclas binarias en condiciones adiabáticas. Además, se realiza un estudio de las propiedades termodinámicas, tales como la energía total, entropía y energía libre de Gibbs, para identificar los procesos fenomenológicos relevantes. En etapas futuras, se planea implementar una optimización basada en la minimización de la producción de entropía, con el fin de mejorar la eficiencia energética del proceso. Este enfoque evita las simplificaciones comunes, tales como flujos internos constantes, desprecio de la dinámica en la fase gaseosa o entalpías constantes, las cuales limitan la modelación a sistemas de dos componentes, permitiendo así abordar sistemas multicomponentes más complejos. El trabajo constituye una contribución significativa hacia la modelación precisa y optimizada de procesos de destilación multicomponente.

Keywords: Destilación, Multicomponente, Modelado

Presenting author's email: alejandro.nava6919@alumnos.udg.mx

S9-abs012

ESTUDIO ESTACIONARIO Y MODELADO DINÁMICO DE LA SEPARACIÓN DE AMONÍACO EN AGUA MEDIANTE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN CON EMPAQUE ESTRUCTURADO

Mariola Camacho Lie¹, Juan Paulo García Sandoval¹, Cristian Jonathan Calderón Cervantes²

¹Universidad de Guadalajara, Departamento de Ingeniería Química, Mexico. ²Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Mexico.

La recuperación de amoníaco es clave para proteger al medio ambiente y obtener beneficios económicos en ciertos procesos industriales. Este estudio se centra en la separación de la mezcla amoníaco-agua posterior a una producción industrial de nitrilos. El propósito es comprender la dinámica del sistema y los fenómenos de transporte implicados, asegurando el cumplimiento de los objetivos de operación, producción y seguridad. El sistema analizado incluye un economizador que aprovecha el calor residual de los fondos de una torre de destilación con empaque estructurado, un termosifón vertical y un condensador total.

Para ello se desarrolla un modelo matemático riguroso bajo un enfoque de no equilibrio con doble película, discretizado por etapas para incorporar balances de masa y energía, tasas de transferencia, ecuaciones hidráulicas, relaciones de equilibrio interfacial y restricciones de fracciones molares. Asimismo, se consideran las especificaciones de diseño y los fenómenos presentes en intercambiadores de calor y válvulas de control. De este modo, se formulan ecuaciones acopladas para el estado estacionario y dinámico, sometidas a un análisis de grados de libertad que garantiza su consistencia y determina las variables relevantes del sistema.

Las simulaciones realizadas en Aspen Plus, Aspen Custom Modeler y Python permitieron caracterizar el proceso con el estado estacionario, usando aproximaciones teóricas y semi-empíricas que no requieren de ajustes paramétricos. Aunque la simulación dinámica presentó dificultades de convergencia debido a la complejidad y rigidez numérica, la investigación aporta una estrategia metodológica sólida y aplicable a casos industriales de similar naturaleza.

Keywords: Destilación, Amoníaco-agua, No equilibrio

Presenting author's email: mariolacamacholie@gmail.com

S9-abs014

Microchips moleculares: Explorando la transferencia de carga en ftalocianinas metálicas mediante simulación de espectros de XAS

Tania Esmeralda González-Robles¹, Mariela Bravo-Sanchez², Mario Ulises Delgado Jaime³

¹Universidad de Guadalajara, Ingenierías-CUCSUR, Mexico. ²Universidad de Guadalajara, Física-CUCEI, Mexico.

³Universidad de Guadalajara, Química-CUCEI, Mexico.

Las ftalocianinas metálicas (Pc) son moléculas conocidas por su gran estabilidad y por su capacidad de alojar un ion metálico en el centro de su estructura. Esta particularidad les otorga propiedades electrónicas y ópticas interesantes, lo que ha motivado su estudio en contextos tan diversos como la catálisis, la electrónica molecular o la biomedicina (Clarke & Dini, 2017; de la Torre et al., 2021).

A pesar de sus múltiples aplicaciones, aún no se comprende completamente cómo el tipo de ion metálico central y las modificaciones químicas alrededor del macrociclo modulan los procesos de transferencia de carga y como se manifiestan en los espectros de absorción de rayos X. Mediante simulaciones de multiplete de espectros de absorción de rayos X (XAS), en este trabajo se busca identificar correlaciones cuantitativas entre la estructura electrónica local, como lo es la covalencia orbital y los espectros simulados. Esto permitirá predecir y optimizar el comportamiento de las Pc en entornos funcionales, facilitando el diseño de materiales con propiedades electrónicas ajustables (Cotton et al., 1999)

Keywords: Transferencia de carga, Simulación de multiplete, Propiedades electrónicas

Presenting author's email: tania.gonzalez0155@alumnos.udg.mx

S9-abs015

IMPACT OF THE ALGAINAS QUANTUM WELLS COMPOSITION ON THE STRUCTURE AND EMISSION OF InAs QUANTUM DOTS EMBEDDED IN AlGaAs/GaAs HETEROSTRUCTURES

Cecilia Mabel Pérez Rivas¹, Tetyana Torchynska², Ricardo Cisneros³

¹Universidad de Guadalajara, CUCEI - Doctorado en Ciencia de Materiales, Mexico. ²Instituto Politécnico Nacional, ESFM, Mexico. ³Universidad Politécnica del Valle de México, División de Nanotecnología, Biotecnología y Agroindustrial, Mexico.

The main objective of this work is to investigate the impact of the composition of the confinement barriers on the light emission of InAs quantum dots embedded in AlGaAs/GaAs heterostructures, as well as on the structural parameters of the heterostructures in various states of growth, following thermal annealing and aging processes. The structures were labeled as #1 and #2, differing in the composition of their confinement barriers. Structure #1 consists of Al_{0.30}Ga_{0.70}As (capping layer) and In_{0.15}Ga_{0.85}As (buffer), while sample #2 have Al_{0.40}Ga_{0.45}In_{0.15}As (capping layer) and In_{0.25}Ga_{0.75}As (buffer), both containing InAs quantum dots. The samples were characterized using two different techniques: Photoluminescence (PL) and High-Resolution X-Ray Diffraction (HR-XRD), which provide information about their emission efficiency and structural parameters. PL studies indicated that after aging, there is an increase in the interdiffusion of Ga/In atoms, affecting the size and homogeneity of the quantum dots. Structure #2AV show the smallest quantum dot size due to the relaxation of elastic stresses, resulting in greater homogeneity in the quantum dot size due to the loss of peripheral quantum dots. HR-XRD studies and numerical adjustments indicate that a lower number of Pendellösung peaks may reflect lower quality in the samples, revealing phenomena of Ga/In interdiffusion, as well as the presence of elastic stress relaxation mechanisms in the structure. The aging time of the samples significantly impacts their compositions and emissions, affecting the homogeneity and quality of the quantum dots.

Keywords: Heterostructures, QDS InAs, HR-XRD

Presenting author's email: cecilia.perez7185@alumnos.udg.mx

S9-abs016

FRACTAL ANALYSIS OF ANAEROBIC DIGESTION DYNAMICS IN A TEQUILA VINASSE REACTOR

Luis Arturo Arroyo Ibarra¹, Juan Paulo García Sandoval¹, Hugo Óscar Méndez Acosta¹

¹Universidad de Guadalajara, CUCEI, Mexico.

Anaerobic digestion is widely used for waste treatment and renewable energy production, but its complex and nonlinear dynamics make real-time monitoring and control challenging. This study focuses on analyzing five key variables from time series data collected in a rising bed reactor treating tequila vinasse, an agricultural wastewater. Fractal analysis was applied by calculating the static Hurst exponent for each series, revealing that the anaerobic digestion process exhibits multifractal behavior with four distinct dynamic regimes across

different time scales. To further explore the temporal dynamics, dynamic Hurst analysis was combined with Principal Component Analysis (PCA), allowing identification of key phenomena and interactions at multiple scales. Understanding these multiscale patterns is crucial for improving process stability and efficiency. These insights provide a valuable foundation for developing advanced monitoring tools and control strategies aimed at optimizing anaerobic digestion performance in industrial applications.

Keywords: Anaerobic Digestion, Fractal Analysis, Principal Component Analysis

Presenting author's email: luis.arroyo8570@alumnos.udg.mx

S9-abs017

Del potencial a la temperatura: Análisis termométrico y ajuste convolutivo para caracterizar el comportamiento térmico de sistemas electroquímicos

Sara Genoveva Hernández-Rizo¹, Erika Roxana Larios Durán², Maximiliano Barcena Soto³

¹Universidad de Guadalajara, Doctorado En Ciencias En Ingeniería Química, Mexico. ²Universidad de Guadalajara, Ingeniería Química, Mexico. ³Universidad de Guadalajara, Licenciatura Química, Mexico.

Cuando los electrones pasan a través de la interfase electrodo/electrolito ocurre una transferencia de calor que genera una variación de la temperatura interfacial (ΔT^*). Esta variación de la temperatura se puede asociar con calores reversibles e irreversibles. Entre los efectos irreversibles se incluyen el calor por sobrepotencial, calor de Joule, conductividad térmica y gradiente de concentración. Por su parte, el calor electroquímico molar de Peltier es el efecto térmico reversible observado en la interfase electroquímica por el flujo de una corriente eléctrica y está relacionado con el cambio de entropía (ΔS) de la reacción.

La detección experimental de ΔT^* se lleva a cabo mediante termometría. La termometría es una técnica que consiste en insertar un termistor de alta precisión en el electrodo de trabajo. La termometría se ha utilizado con técnicas electroquímicas convencionales que implican la aplicación de corriente continua (CC) y, recientemente, con corriente alterna (CA). En este trabajo se presentan mediciones de ΔT^* bajo técnicas electroquímicas de CC y CA, complementando con un ajuste convolutivo aplicado a la ciclometría, lo que permite describir con mayor precisión la dinámica térmica y mejorar la interpretación de la respuesta interfacial.

El análisis del comportamiento térmico de sistemas electroquímicos ofrece información clave para mejorar el control de carga/descarga de baterías redox, para prevenir sobrecalentamiento en dispositivos y para diseñar reactores electroquímicos con mayor eficiencia energética.

Keywords: Termometría electroquímica, Variación de temperatura interfacial, Funciones de Green

Presenting author's email: sara.hernandez@alumnos.udg.mx

S9-abs018

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LA CROMITA DE COBALTO (COCR₂O₄) POR EL MÉTODO SOL-GEL

Nestor Daniel Flores Bermúdez¹

¹Universidad de Guadalajara, Departamento de Física, Mexico.

En este trabajo se desarrolló la síntesis y caracterización del material CoCr_2O_4 por el método sol-gel asistido por radiación de microondas. El objetivo de la síntesis fue lograr la cristalización de la espinela normal CoCr_2O_4 usando menores temperaturas que las utilizadas en los métodos tradicionales. Para la síntesis se utilizaron los nitratos de cromo y cobalto como precursores, junto con alcohol etílico como solvente para la obtención del polvo. La espinela sintetizada se caracterizó mediante difracción de rayos X (XRD) y espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), con el fin de analizar su estructura cristalina y molecular, la presencia de impurezas, así como el tamaño de cristalito. Los resultados indican que la espinela CoCr_2O_4 cristaliza en una estructura cúbica centrada en las caras (fcc) con un grupo espacial de simetría de $\text{Fd}3\text{m}$ (227), tras la calcinación de 600 °C durante 5 h. El tamaño del cristalito se estimó en 35,11 nm, dentro de un rango de 22 a 76 nm.

Keywords: CoCr_2O_4 , Sol-gel, XRD-FTIR

Presenting author's email: nestor.flores0106@alumnos.udg.mx

S9-abs002

Estudio computacional de la reactividad electrónica en nuevos análogos cannabinoides

Jesús Lara¹, Daniela Navarro-Acosta², Roberto Flores-Moreno¹

¹Universidad de Guadalajara, Química, Mexico. ²Grupo de Investigación Química Cuántica y Teórica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Colombia.

En el presente estudio computacional se analizó el perfil de reactividad electrónica de 27 análogos cannabinoides mediante el uso exhaustivo de funciones auxiliares de la Teoría del Funcional de la Densidad Auxiliar (ADFT) y la Teoría de Perturbación de la Densidad Auxiliar (ADPT). Estas moléculas están diseñadas a partir de la estructura básica del cannabinoide sintético JWH-015, un agonista selectivo de receptores cannabinoides, con el objetivo de generar análogos estructuralmente modificados que ofrezcan un perfil terapéutico superior al de compuestos ya conocidos. A partir de modificaciones sistemáticas en el sustituyente del nitrógeno indólico y en la funcionalización en posición 3 del anillo indólico, se lograron establecer relaciones claras entre la disposición funcional, la densidad de los orbitales y la reactividad electrónica global y localizada.

Los descriptores de reactividad global mostraron que los grupos $-\text{CO}-\text{R}$ inducen un carácter más electrofílico y rígido, mientras que los fragmentos $-\text{CH}_2-\text{COOtBu}$ confieren mayor flexibilidad electrónica. La introducción de grupos $-\text{OH}$ y $-\text{CH}_3$ en el anillo arilo en algunas moléculas intensificó la aceptación de carga y elevó la dureza química, lo que sugiere un comportamiento polarizable útil en interacciones moleculares. El análisis de reactividad local reveló que los sitios para la donación y aceptación electrónica están espacialmente

separados en varias moléculas, favoreciendo procesos de transferencia de carga intramolecular o interacción dirigida con especies externas. Estas características electrónicas aportan criterios útiles para el diseño racional de derivados cannabinoides, con potencial para mejorar su afinidad, selectividad y perfil bioactivo frente a dianas terapéuticas específicas.

Los resultados muestran que pequeñas variaciones en la estructura molecular generan diferencias significativas en la distribución orbital, la polarización electrónica y la estabilidad frente a procesos de donación o aceptación de carga. Estas características se traducen en una mejora del control sobre la reactividad, mayor versatilidad para establecer interacciones específicas y un perfil electrónico más favorable para aplicaciones terapéuticas. El diseño racional basado en estas modificaciones ofrece una base sólida para el desarrollo de compuestos con propiedades optimizadas en comparación con moléculas previamente estudiadas, como JWH-015, THC y 2-araquidonoilglicerol.

Keywords: reactividad electrónica, cannabinoides, química computacional

Presenting author's email: jesusalfredo.lara@academicos.udg.mx

S9-abs003

LAYERED DOUBLE HYDROXIDES AS VEHICLES FOR LOADING AND RELEASING DOXORUBICIN AND 5-FLUOROURACIL

Minerva Ventura¹, Gregorio Carbajal²

¹Universidad de Guadalajara, Innovation Based On Information And Knowledge, Mexico. ²Universidad de Guadalajara, Chemistry, Mexico.

In this research, layered double hydroxides (LDH) are proposed as drug delivery vehicles due to their ability to enhance the therapeutic effects of active pharmaceutical ingredients while potentially reducing toxicity. Doxorubicin (DOX) and 5-Fluorouracil (5-FU) are among the most widely studied and applied antitumor agents because of their broad-spectrum activity against various types of cancer. However, both drugs exhibit several limitations, including low plasma bioavailability, poor solubility, and slow systemic clearance. As a result, only a small fraction of the administered drug reaches the tumor cells, often causing significant side effects in patients. To address these drawbacks, LDH are explored as nanocarriers to improve delivery efficiency.

The most common drug-loading approach involves incorporating LDH particles into DOX and 5-FU solutions. In this study, three synthesis methods—*anion exchange*, *coprecipitation*, and *mechanochemical synthesis*—were employed to evaluate the structural stability of the carriers and the amount of drug retained. Two common LDH compositions, Mg/Al and Zn/Al, were used due to their biomedical relevance. The resulting LDH and LDH/drug hybrids were characterized using solid-state techniques such as XRD, FTIR, EPR, Raman, and EDS; complemented with a computational analysis to elucidate the structure and types of interactions, as well as to predict a UV–Vis spectrum for the release profile.

The Zn/Al LDH structure degraded during drug loading, while Mg/Al LDH particles remained structurally stable under all three loading methods. Notably, the mechanochemical method achieved the highest DOX loading capacity and proved to be the simplest and least aggressive of the three approaches.

Keywords: Layered double hydroxides, Anti tumorals, Nanoparticles

Presenting author's email: minerva.ventura@academicos.udg.mx

S9-abs009

Ortoferrita de cationes mixtos $\text{La}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{FeO}_3$ y su eficiencia para la reacción de evolución de oxígeno (OER).

Mayra Yazmin González Vázquez¹, Araceli Sánchez Martínez², Oscar Ceballos Sánchez², Edgar R. López Mena³, Ismailia L. Escalante García⁴, Gildardo Sánchez Ante³

¹Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas E Ingeniería, Mexico. ²Universidad de Guadalajara, Departamento de ingeniería de Proyectos, Mexico. ³Tecnológico de Monterrey, Escuela de ingeniería y Ciencias, Mexico. ⁴Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ciencias Químicas, Mexico.

Los óxidos ternarios con estructura tipo perovskita ABO_3 , particularmente aquellos que contienen metales de transición, son de gran interés por su flexibilidad estructural y composicional, así como por su actividad catalítica en la reacción de evolución de oxígeno (OER) en medio alcalino [1]. Investigaciones teóricas previas sugieren que el hierro en la posición B de estas estructuras se asocia con bajos sobrepotenciales. Las ortoferritas, perovskitas distorsionadas de fórmula general RFeO_3 (R = elemento de tierra rara trivalente), presentan iones Fe^{3+} en coordinación octaédrica (FeO_6). La presencia de elementos de tierra rara con orbitales d y f parcialmente ocupados confiere a estos materiales propiedades multiferroicas, conductividad iónica, características dieléctricas y actividad catalítica, lo que los hace relevantes para micro y nanotecnología. Los cationes en el sitio A pueden influir directamente en el estado de valencia de los iones del sitio B, la conductividad electrónica, la estructura cristalina, el área electroquímicamente activa y la concentración de vacantes de oxígeno[1]. La distorsión de los octaedros FeO_6 , inducida por la sustitución parcial o total de los cationes A y/o B con radios iónicos diferentes, permite modular las propiedades fisicoquímicas del material[1], [2], [3]. Es por ello que, en esta investigación, se sintetizó la ortoferrita $\text{La}_{0.5}\text{Nd}_{0.5}\text{FeO}_3$ mediante el método de combustión. Se analizaron sus propiedades estructurales, morfológicas, texturales, optoelectrónicas y superficiales utilizando difracción de rayos-X, microscopía electrónica de barrido, análisis de adsorción de nitrógeno, espectroscopía UV-Vis de reflectancia difusa, fotoluminiscencia (PL) y espectroscopía fotoelectrónica de rayos-X (XPS). Finalmente, se estableció una relación entre las propiedades fisicoquímicas obtenidas y su actividad electrocatalítica para la reacción OER.

Keywords: Ortoferritas, Combustión, OER

Presenting author's email: gonzalez.mayra.3a@gmail.com

S9-abs013

EFFECTO DE LOS PARÁMETROS DE SÍNTESIS SOBRE LAS PROPIEDADES POROSAS DE HEXACIANOFEERRATOS DE COBALTO Y SU APLICACIÓN PARA LA CAPTACIÓN DE CO_2

Paloma Margarita Frias Ureña¹, María de Jesús Palacios Sanchez², Bernardo Antonio Zúñiga Gutiérrez², Alberto Gutiérrez Becerra³, Maximiliano Barcena Soto², Sergio Gómez Salazar¹

¹Universidad de Guadalajara, CUCEI-Departamento de Ingeniería Química, Mexico. ²Universidad de Guadalajara, CUCEI-Departamento de Química, Mexico. ³Universidad de Guadalajara, CUTonala-Departamento

de Ciencias Básicas y Aplicadas, Mexico.

La relación que existe entre la porosidad con las estequiometrías del hexacianoferrato de cobalto (CoHCF) ha sido poco explorada. Este trabajo presenta 15 CoHCFs con diferentes estequiometrías, resultado de la síntesis con diferentes metales alcalinos (Na y K) y estados de oxidación del hierro (Fe^{2+} y Fe^{3+}), variando la concentración de cobalto (Co^{2+}). Los CoHCFs fueron caracterizados por adsorción de nitrógeno, espectroscopia de infrarrojo (FTIR-ATR), análisis termo-gravimétrico (TGA), microscopía electrónica de barrido (SEM) y voltamperometría cíclica (CV). También se realizó la optimización energética teórica de la celda unitaria. Los resultados de adsorción de N_2 revelan áreas específicas más desarrolladas en las muestras que contienen mezclas de iones $\text{K}^+/\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ (sistema III), donde la muestra que contiene más cantidad de Co^{2+} es la que posee la mayor mesoporosidad y microporosidad. Por TGA se encontró que la cantidad de agua en las muestras aumenta conforme aumenta la concentración de iones Co^{2+} durante la síntesis, lo cual mejora las propiedades texturales y de porosidad de los compuestos.

La captación de CO_2 (3.04mmol/g) por CoHCF es comparable con otros materiales reportados. La cinética de adsorción del CO_2 es rápida (3-6s) en los CoHCFs, además de mostrar selectividad de adsorción frente al N_2 . Lo que los hace atractivos para aplicaciones en operaciones continuas, tales como las chimeneas industriales. El calor isostérico de adsorción revela que el proceso es por adsorción física, por lo que el material puede ser sometido a ciclos de adsorción-desorción sin sufrir cambios químicos ni estructurales.

Keywords: captación de CO_2 , hexacianoferratos de cobalto, microporosidad

Presenting author's email: paloma.frias@academicos.udg.mx

Aguilar Ramírez, Alejandro S9-abs005
Alfonso Acosta, Yoel S9-abs008
Aranda Garcia, Francisco José S9-abs004
Arellano Martínez, Martín Rigoberto S9-abs007
Arroyo Ibarra, Luis Arturo S9-abs016
Badillo Camacho, Jessica S9-abs008
Barajas Cervantes, Alfonso S9-abs007
Barcena Soto, Maximiliano S9-abs013, S9-abs017
Bravo Sanchez, Mariela S9-abs014
Calderón Cervantes, Cristian Jonathan S9-abs012
Camacho Lie, Mariola S9-abs012
Carbajal, Gregorio S9-abs003
Castañeda Morones, Noe S9-abs001
Ceballos Sánchez, Oscar S9-abs009
Cisneros, Ricardo S9-abs015
Cisneros López, Erick Omar S9-abs004
de Anda Lomelí, Edwin Yered S9-abs005
Delgado Jaime, Mario Ulises S9-abs014
Escalante García, Ismailia L. S9-abs009
Flores Bermúdez, Nestor Daniel S9-abs018
Flores Moreno, Roberto S9-abs002
Frias Ureña, Paloma Margarita S9-abs013
García Sandoval, Juan Paulo S9-abs012, S9-abs011, S9-abs016
Gómez Salazar, Sergio S9-abs013, S9-abs008
Gonzalez Gonzalez, Pedro Daniel S9-abs006
Gonzalez Nuñez, Ruben S9-abs006
González Vázquez, Mayra Yazmin S9-abs009
González Robles, Tania Esmeralda S9-abs014
Gutiérrez Becerra, Alberto S9-abs013
Gutiérrez Ortega, José Antonio S9-abs008
Hernández Rizo, Sara Genoveva S9-abs017
Huerta Marcial, Silvia Teresa S9-abs005
Lara, Jesus S9-abs002, S9-abs001
Larios Durán, Erika Roxana S9-abs017
López Mena, Edgar R. S9-abs009
Macias Balleza, Emma Rebeca S9-abs005
Macias Lamas, Adriana Macaria S9-abs008
Méndez Acosta, Hugo Óscar S9-abs016
Méndez García, Jahaziel S9-abs004
Moran Salazar, René Guadalupe S9-abs008
Mota Morales, Josue S9-abs005
Munguía Medina, Sergio Javier S9-abs011
Muñoz Gómez, José Antonio S9-abs004
Nava Téllez, Alejandro Cristopher S9-abs011
Navarro Acosta, Daniela S9-abs002
Ortega Cordova, Raul S9-abs005
Palacios Sanchez, María de Jesús S9-abs013
Pérez Rivas, Cecilia Mabel S9-abs015
Pérez Fonseca, Aida Alejandra S9-abs007
Robledo Ortiz, Jorge Ramón S9-abs007

Sánchez Ante, Gildardo S9-abs009
Sánchez Martínez, Araceli S9-abs009
Torchynska, Tetyana S9-abs015
Ventura, Minerva S9-abs003
Zúñiga Gutiérrez, Bernardo Antonio S9-abs013