

**Abstracts  
Book**

INTERNATIONAL MEETING FOR RESEARCHERS IN

# MATERIALS & PLASMA


TECHNOLOGY - IMRMPT

**4<sup>th</sup> IMRMPT**  
**May 23-26 / 2017**

**Santa Marta - Colombia**



**Foristom**  
Foundation  
of Researches in Science  
and Technology of Materials



4<sup>th</sup> INTERNATIONAL MEETING FOR RESEARCHERS IN  
**MATERIALS & PLASMA**  
TECHNOLOGY - IMRMP/T

# Topics

- New Materials
- Renewable Energy
- Structural Integrity
- Biomedical Coatings
- Additive Manufacturing
- Online Process Control
- Non Destructive Evaluation
- Laser and Hybrid Processes
- Surface Hardening
- Characterization of Materials
- Thin Films and Nanomaterials
- Wear and Corrosion and Diagnostics
- Modeling, Simulation and Technologies
- Plasma Applications in Materials Science and Technology
- Education in Materials Science and Technology
- Surface Modification (Ion Implantation, Ion Nitriding, Sputtering, Sol-Gel, Thermal Spray, PVD, CVD)



**Foristom**  
Foundation  
of Researches in Science  
and Technology of Materials

**Ely Dannier V. Niño**

Director IMRMPT

**Ely Dannier V. Niño**

Editor and Layout Coordinator / Editor y Coordinador de Diagramación

**Germán Quiñonez**

Cover Design / Diseño Carátula

**Germán Quiñonez**

Web Design / Diseño Web

**Fredy Humberto Vera Rivera**

Web Programming / Programación Web

## **Información Dirección Postal de la Memoria**

Ely Dannier V. Niño

Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials (FORISTOM)

Bucaramanga, Santander, Colombia

E-mail: [imrmpt@gmail.com](mailto:imrmpt@gmail.com) - [foristom@gmail.com](mailto:foristom@gmail.com)

Copyright © 2017 FORISTOM – FUNDACIÓN OF RESEARCHERS IN SCIENCE AND TECHNOLOGY OF MATERIALS. Libro de Resúmenes del Cuarto Encuentro Internacional de Investigadores en Materiales y Tecnología del Plasma (4th IMRMPT), ISSN 2422-3824. Esta es una publicación del Encuentro Internacional de Investigadores en Materiales y Tecnología del Plasma (IMRMPT). La responsabilidad de los resúmenes publicados compete a los autores mismos.

## **Directives / Directivas Fundación: of Researchers in Science and Technology of Materials**

**Ely Dannier V. Niño**

Director Ejecutivo

**José José Barba Ortega**

Director Administrativo y Financiero

**Héctor Jaime Dulcé Moreno**

Director Académico

**Alejandro David Martínez Amariz**

Secretario

**Fredy Humberto Vera Rivera**

Director de Sistemas de Información

## **Organizing Committee / Comité Organizador Local**

Harold Paredes Gutiérrez (Coordinador)

José José Barba Ortega

Héctor Jaime Dulce Moreno

Alejandro David Martínez Amariz

Alfonso Santos Jaimes

Ely Dannier V. Niño

## **Comité Académico Nacional**

- Dr. Héctor Jaime Dulce Moreno  
Facultad de Ciencias Básicas  
Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta
- Dr. José José Barba Ortega  
Departamento de Física  
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.
- Dra. Miryam Rincón Joya  
Departamento de Física  
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.
- Dr. Hugo Armando Estupiñan Durán  
Departamento de Materiales y Minerales  
Universidad Nacional de Colombia, Medellín
- Dr. Alejandro David Martínez Amariz  
Facultad de Ingeniería  
Universidad de Santander, Bucaramanga
- Dr. Fredy Antonio Rodríguez Prada  
Facultad de Ciencias Exactas, Física y Naturales  
Universidad de Santander, Bucaramanga
- Dr. Henry Riascos Landázuri  
Departamento de Física  
Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira
- Dra. Diana Padilla Rueda  
Programa de Física  
Universidad del Atlántico, Barranquilla

- Dr. Harold Paredes Gutiérrez  
Escuela de Física  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Darío Yesid Peña Ballesteros  
Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Valeriy D. Dugar-Zhabon  
Escuela de Física  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Eduardo Alberto Orozco Ospino  
Escuela de Física  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. William Gutiérrez Niño  
Escuela de Física  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Carlos Leonardo Beltrán Ríos  
Escuela de Física  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. David Alejandro Miranda Mercada  
Escuela de Física  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Rafael Cabanzo Hernández  
Escuela de Física  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dra. Claudia Paulina González Cuervo  
Departamento Ciencias Básicas  
Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga
- Dr. (c) Jesús David González Acosta  
Facultad de Ingenierías  
Universidad del Magdalena, Santa Marta
- Dr. (c) Fredy Humberto Vera Rivera  
Programa de Ingeniería de Sistemas  
Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta
- Dr. (c) Boris Raniero Pérez Gutiérrez  
Programa de Ingeniería de Sistemas  
Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta
- Dr. (c) Fredy Fabián Parada Becerra  
Escuela de Física  
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- MSc. Hernán Alfonso Garnica  
UEN Tecnologías  
Corporación para la Investigación de la Corrosión, Piedecuesta
- MSc. Fernando Durán Flórez  
Departamento Ciencias Básicas  
Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga
- MSc. Alfonso Santos Jaimes  
Facultad de Ingeniería Mecánica  
Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga

## Comité Académico Internacional

- Petr Tsygankov  
Universidad Técnica Estatal de Bauman, Moscú  
Rusia
- Andrés Díaz Lantada  
Universidad Politécnica de Madrid, Madrid  
España
- Juan Manuel Muñoz Guijosa  
Universidad Politécnica de Madrid, Madrid  
España
- Iván Fernández Martínez  
Nano4Energy, Madrid  
España
- Eduardo Daniel Méndez Morales  
Universidad de la República, Montevideo  
Uruguay
- Mariana Pereyra  
Universidad de la República, Montevideo  
Uruguay
- Elvis Oswaldo López Meza  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro  
Brasil
- Humberto José Jiménez  
Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Puerto Ordaz  
Venezuela
- Linda Elcida Gil Lozada  
Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Puerto Ordaz  
Venezuela
- Jaime Andrés Pérez Taborda  
Instituto de Microelectrónica de Madrid, Madrid  
España
- Manuel José Andrade Romero  
Universidad Federal de Rio de Janeiro, Rio de Janeiro  
Brasil
- Angela Lorena Cardenas Manosalva  
Universidad Federal de Rio de Janeiro, Rio de Janeiro  
Brasil
- Monica Arenas  
Universidad Federal de Rio de Janeiro, Rio de Janeiro  
Brasil
- Sugheis Liscano Durán  
Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Puerto Ordaz  
Venezuela

## Conferencistas Invitados Internacionales

- ✓ Petr Tsygankov  
Universidad Técnica Estatal de Bauman, Moscú, Rusia
- ✓ José Luis Endrino  
Universidad de Cranfield, Cranfield, Reino Unido
- ✓ Juan Manuel Muñoz Guijosa  
Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, Spain
- ✓ Antonio Rivera de Mena  
Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, Spain
- ✓ Iván Fernández Martínez  
Nano4Energy, Madrid, Spain
- ✓ Eduardo Daniel Méndez Morales  
Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
- ✓ Igor Alessandro Silva Carvalho  
Horiba Instruments, São Paulo, Brazil
- ✓ Elaine Cristina Paris  
Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, São Carlos, Brazil
- ✓ Enrique Mariano Castrodeza  
Universidad Federal de Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil
- ✓ Linda Elcida Gil Lozada  
Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Puerto Ordaz, Venezuela

## Contenido

<b>Invited Keynote Speaker</b> .....	15
What are the benefits of nanofilm and coatings research partnerships?.....	16
Industrial applications of magnetron sputtering coatings and processes: DLC and HIPIMS.....	17
Design of nano/microcrystalline diamond coating at cemented carbide WC-6% Co tools.....	19
Processing of cellular metals by molten metal infiltration .....	20
Modelling strategies for carbon polymer nanocomposites.....	22
Electrochemical impedance spectroscopy (EIS) in micrometric spaces for the characterization of nanomaterials.....	23
Advanced optical spectroscopy applied to nanomaterials science & engineering .....	24
Nanoparticulate ceramic materials for water decontamination and agribusiness applications.....	26
Internal corrosion in the oil and gas industry .....	28
<b>Additive Manufacturing - AM</b> .....	30
Improving of strength and durability in commercial cement mortar adding cladodes of Nopal (opuntia ficus indica).....	31
Mechanical properties of ceramic structures based on triply periodic minimal surface (TPMS) processed by 3D printing .....	33
Manufacturing of substrates with nanofillers of copper and oxide graphene.....	35
<b>Biomedical Coatings - BC</b> .....	36
Nanometrology at Biomaterials Laboratory in Uruguay .....	37
$\beta$ -tricalcium phosphate coatings on AISI 316 stainless steel for applications as biomaterials.....	38
Biodegradable fluoride-based coatings on the Elektron 21 magnesium alloy as potential use for fabrication of biodegradable orthopedic implants.....	40
Chemical and morphological study of bioactive glass coatings submerged in SBF for biomedical applications..	42
Corrosion of Ti6Al4V ELI surfaces texturized by CO <sub>2</sub> laser in SBF .....	44
Effect of pulsed current electrodeposition parameters of calcium phosphates coating on Ti6Al4V ELI .....	45
Formation of Ca/P ceramic coatings by Plasma Electrolytic Oxidation (PEO) on Ti6Al4V ELI alloy.....	46
HOS cell adhesion on Ti6Al4V ELI texturized by CO <sub>2</sub> laser.....	47
In vitro electrochemical behavior of Chitosan - PEG coatings obtained on Ti6Al4V by dip coating .....	48
Study of hydroxyapatite adhesion on surgical screw to use in bone implant.....	49
<b>Characterization of Materials - CM</b> .....	50
Analysis of the flexural strength of boards composite with natural resin and Guadua unidirectional fibers .....	51
Characterization composicional, thermal and magnetic of flying ashes of coal .....	52
Characterization of films formed by diffusion aluminizing applied on T91 steel.....	54
Characterization of puzolanic materials from residual sludge from water treatment using XRD.....	55



Characterization of starch/sodium montmorillonite composite (starch/Na-MMT) and its application for removal cobalt (II) and nickel (II) ions from aqueous solutions .....	56
Compositional, thermal and microstructural characterization of the nopal (opuntia ficus indica).....	58
Density functional study on the adsorption of carbon atoms on hexagonal-(0001) BN surface .....	59
Determination of the coefficient of dynamic friction between coatings of alumina and metallic materials .....	61
Effect of grain size in the reduction of lateritic Ni ore in Linder reactor .....	63
Effect of temperature on the structure and chemical composition of zeolites sintered from fly ash from coal combustion .....	65
Effects of CaO on the compaction and sintering by plasma of powder metallurgical iron .....	67
Electrical behavior of LaFe <sub>0.2</sub> Co <sub>0.8-x</sub> Cr <sub>x</sub> O <sub>3</sub> (x=0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8) perovskite type oxide as anode in solid oxide fuel cells.....	68
Evaluation of removal of heavy metals water pollutants using polyacrylamide/sodium montmorillonite composite (PAM/Na-MMT).....	71
Formation and decomposition of siderite for carbon dioxide treatment.....	73
Global characterization of a liquid cristal display LCX038ARA in pure-phase using the retarder-rotor model ...	74
Implementation and characterization of influent variables in dewaxing and sinterized in the investment casting process .....	75
Influence of Nitrogen on the optical properties of ZrO <sub>x</sub> Ny thin films .....	76
Influence of the ionic radius on structural and magnetic response of the system Pr <sub>0.48</sub> TR <sub>0.02</sub> Ca <sub>0.5</sub> CoO <sub>3</sub> .....	77
Mechanical and physical characterization of guadua angustifolia kunth fibers from Colombia.....	78
Mechanical and physical characterization of panels elaborated with Arundo Dónax fibers and vegetal resin .....	79
Mechanical and physical characterization of pita fibers from Colombia .....	80
Mn-modification effects on Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub> structural, optical and vibrational properties.....	81
Morphology, crystallographic structure, corrosion resistance and biocompatibility of zirconium oxynitride films	83
On the high-temperature phase transitions of the superprotonic conductor Cs <sub>5</sub> H <sub>3</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>4</sub> ·xH <sub>2</sub> O: they really exist?.....	84
Optimization of chalcopyrite flotation process by changing of particle size and dismantling stage.....	85
Physico-mechanical characterization of cocos nucifera fibers from Colombia.....	87
Production, structural characterization and magnetic of system Pr <sub>0.5-x</sub> Dy <sub>x</sub> Ca <sub>0.5</sub> CoO <sub>3</sub> (x=0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08).....	88
Relation between environmental factors and deterioration of the defensive walls of Cartagena de Indias .....	89
Rheological behaviour of magnetorheological fluids subjected to constant field .....	90
Spectra Raman of low temperatures and high pressures of calcium oxide .....	91
Stabilization of the geomechanical behavior in Tunja city area's expansive clays of the northeast with calcareous materials extracted from the Cundi-Boyacense high plateau .....	92
Structural and electrical characterization of the Ce <sub>0.8</sub> Pr <sub>0.2</sub> O <sub>2</sub> system .....	94
Structural and morphological evaluation of the CaTi <sub>1-x</sub> M <sub>x</sub> O <sub>3</sub> system (M=Dy, Ho, Gd, Ni) (x=0.5).....	95

Study of optical and structural properties of perovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PBI <sub>3</sub> thin films prepared by sequential evaporation .....	97
Synthesis and characterization of calcium phosphate derived from fish otoliths .....	99
Synthesis and Characterization of Cerium doped LaFeO <sub>3</sub> at different concentrations .....	100
Synthesis and characterization of indium oxide (In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) doped with transition metals .....	101
Synthesis and characterization of the Bi <sub>0.94</sub> Gd <sub>0.06</sub> FeO <sub>3</sub> system .....	102
Synthesis and characterization structural, optical and electrical of CU <sub>2</sub> ZNSNS <sub>4</sub> (CZTS) thin films prepared by co-evaporation using a novel procedure .....	104
Technological characterization test implementation as a solution for the pathologies founded in coating and finishing works in constructions .....	105
High-temperature thermal behaviour of ammonium dihydrogen phosphate .....	107
<b>Modeling, Simulation and Diagnostics – MSD</b> .....	108
2D and 3D virtual interactive laboratories of physics on Unity platform .....	109
Adsorption of arsenate on Fe-(hydr) oxide .....	111
Applicability of TDGL theory in superconductors .....	112
Artificial impurities in a superconducting flat: resistive response .....	113
Building a 3D virtual simulator of the reactor used for superficial modification of metals .....	114
Critical and compensation behaviors of a mixed spin-2-spin-5/2 Ising ferrimagnetic system .....	115
Electrons beam acceleration in a TE <sub>113</sub> cylindrical cavity affected by a static inhomogeneous magnetic field .....	116
Independent component analysis to the signal processing of Raman spectra of human breast cancerogenic tissue .....	117
Mathematical model for predicting probability of corrosion fault, indoor, and low voltage (SCC) .....	118
Modeling and seismic verification of a historic building in masonry .....	119
Simulation of the capture forces in optical tweezers type .....	120
Simulation of the electromagnetic field in a cylindrical cavity for the heating of the plasma in an ECR source of multicarged ions .....	121
Transport spin dependent in nanostructures: Current and geometry effect of quantum dots in presence of spin-orbit interaction .....	123
Unconventional vortex states due to anisotropy included in the nanoscale superconductors .....	124
Vortex state in nano-structured systems superconductor-superconductor and superconductor-metal .....	125
Web application implementation for information management scientific and technology of FORISTOM .....	126
Comparison between the analytical and numeric model used in the determination of the temperature field in a free convective vortex (FCV) .....	127
Effect of conduction band nonparabolicity on Aharonov-Bohm oscillations in N-type InAs/GaAs quantum ring .....	129
<b>New Materials – NM</b> .....	130
Adsorption and lateral diffusion of C atoms on wurtzite (0 0 0 1)-AlN surface .....	131
Adsorption of chromium on two-dimensional hexagonal ZnO surface .....	132
A theoretical study of half-metallic ferromagnetic behaviour of C-doped zincblende-AlN .....	133
Blast furnace dust and phosphoric slag, new materials for using in road engineering .....	134

Characterization and obtainment of concentrates in phosphoric rocks of Turmequé (Boyacá) .....	135
Combustion in solution synthesis of Zn <sub>2</sub> TiO <sub>4</sub> doped with Ag for photocatalytic and photodynamic applications in the visible .....	136
Development of a low cost adsorbent material for the removal of dyes present in wastewater .....	138
Development of new textile materials from Colombian natural fibers .....	139
Development of refractories by Freeze Casting processing .....	141
Effect of the surface modification of the fibers in the physical and mechanical properties of panels made with materials of vegetal origin .....	143
Elaboration and characterization of porous ceramics based on kaolin, diatomite and calcium carbonate from Chivatá, Boyacá.....	144
Epitaxial growth of graphene on GaN(0 0 0 1) surface: A first principles study .....	146
Evaluation of Colombian clays for obtaining ceramic pastes of high specific strength.....	147
Evaluation of the processing variables of the sol-gel technique on surface properties of silicon deposited on ceramic tiles.....	149
Fabrication of open pore magnesium foams: Liquid infiltration.....	151
First-Principles study of electronic and magnetic properties for Cr-doped bulk NbN .....	153
First-principles study of electronic and magnetic properties of the 2D-hexagonal monolayer Mn-doped AlN ..	154
Gadolinium-doped NbN: A first principles study .....	155
Hydrothermal synthesis of Cu <sub>2</sub> ZnTiS <sub>4</sub> (CZTiS) and Cu <sub>2</sub> ZnSnS <sub>4</sub> (CZTS) materials by a hydrothermal route in two reaction stages .....	156
Inclusion of geopolymers derivated from fly ash and pumice in reinforced concrete.....	158
Influence of MWCNT/surfactant dispersions on the mineralogical and mechanical properties of portland cement pastes .....	160
New materials development with potential applications in (bio)materials for bone implants .....	162
Nitrogen doped with phosphorus: An ab initio study .....	163
Performance of additions in concrete with black slags and protection of reinforcement steel.....	164
Production of activated coal from wood wastes .....	166
Removal and recovery of phosphorus using hybrid materials.....	167
Review on the synthesis and characterization of conductive polymer nanowires and their applications .....	168
Spraying of hydroxyapatite biocompatible films by detonation.....	170
Structural and magnetic analysis of the Bi <sub>1-x</sub> Sm <sub>x</sub> FeO <sub>3</sub> system.....	171
Structural and magnetic analysis of the Pr <sub>1.5</sub> Eu <sub>1.5</sub> Ba <sub>5</sub> Cu <sub>8</sub> O <sub>18</sub> System .....	172
Structural and mechanical study of concrete made from cementitious materials of low environmental impact .	173
Structural, electrical, and magnetic properties in the system Na <sub>0.5</sub> CoO <sub>3</sub> .....	174
Structural, mechanical and electronic properties of two-dimensional honeycomb structure of group III-arsenide binary compounds: An ab-initio study .....	175
Structural properties of La <sub>3,5-x</sub> Ba <sub>4,5+x-y</sub> CayCu <sub>8</sub> O <sub>18</sub> system (0.2).....	177
Study of electronic properties of hexagonal Mo <sub>0.5</sub> W <sub>0.5</sub> N <sub>2</sub> monolayer.....	178

Study of structural properties of paracetamol, interacting with calcium lignosulphonates, in different environments, for the treatment of pharmacologically contaminated waste water .....	179
Substitution of carbon atoms in a graphene-like monolayer of AlN. Etudy of electronic and magnetic properties	181
Synthesis and characterization of the Pr <sub>2.5</sub> Eu <sub>0.5</sub> Ba <sub>5</sub> Cu <sub>8</sub> O <sub>18</sub> .....	182
Use of steel slag as a new material for roads.....	183
Hydrothermal synthesis of a photovoltaic material based on CuIn <sub>0.5</sub> Ga <sub>0.5</sub> Se <sub>2</sub> .....	184
<b>Plasma Applications and Technologies – PAT</b> .....	186
Effect of surface preparation on the adhesive-cohesive strenght of coatings applied by atmospheric plasma spray onto stainless steel .....	187
Effect of the frequency on the structure of TiO <sub>2</sub> coatings growth by plasma electrolytic oxidation.....	188
Characterization and extraction of lipids from WWTP sludge for the production of biodiesel .....	190
Nanoestructuration of luffa fibbers by plasma glow discharge in nitrogen atmosphere .....	192
<b>Renewable Energy – RE</b> .....	193
Comparative study of the power supply in two osmotic membrane modules by dead-end flow fed with cyanide water .....	194
Comparison of two temperature control techniques in a forced water heater solar system .....	196
Construction, study and mathematical modelling of the electrical behavior of CZTS photovoltaic materials as function of time and synthesis temperature .....	197
Design of a residential micro-network in Lagos del Cacique, Bucaramanga Colombia .....	199
Hydrothermal synthesis and characterization of the semiconductor material Cu <sub>2</sub> ZnTiS <sub>4</sub> .....	201
Magnetic field effect on excitons in MAPbI <sub>3</sub> perovskite.....	203
Optical and mechanical characterization of absorber surfaces of solar collectors subjected to durability tests...	204
Performance of thermal storage system by parafin wax and fatty acid .....	207
Production of biogas from organic solid residues, by the use of biogidestor in bank scale .....	208
Synthesis and characterization of the LiMn <sub>2</sub> O <sub>4</sub> crystalline ceramic oxide .....	210
Synthesis of a proton exchange membrane using styrene-acrylic ester copolymer and loaded with vanadium pentoxide for application in fuel cells .....	212
Wind potential of the municipality of Soledad (Atlántico) for renewable electricity generation .....	213
<b>Surface Hardening Processes - SHP</b> .....	214
Determiration of the influence of austempering applied to invesment casting steel IC 4140 .....	215
<b>Structural Integrity - SI</b> .....	216
Assessing of the effect of hydrodynamics in the growth of scale (CaCO <sub>3</sub> ) in rotating cylinder electrode.....	217
Correlation between the thermal performance and the microstructure of the material used in medium and high voltage transformer.....	218
Evaluation of corrosión inhibitor simulating conditions of operation .....	220
<b>Surface Modification (Ion Implantation, Ion Nitriding, Sputtering, Sol-Gel, Thermal Spray, PVD, CVD) - SM</b> .....	221
Effect of surface roughness on nitriding processes by dielectric barrier discharges of carbon steel.....	222

Evaluation of the electrical conductivity and corrosion resistance for layers deposited via sputtering on stainless steel.....	223
Evaluation of tribological wear and erosion in coatings of diamalloy 4060NS deposited by thermal spray .....	225
Measurement of the energy characteristics of the titanium ion flux from a vacuum arc evaporator .....	227
Modification with titanium nitride (TiN) in the surface of the material used in the internal combustion engines manufacturing.....	228
Nanostructured portable system of water pre-treatment for in situ sensing devices .....	230
Optimization of the parameters for obtaining zirconium-alumina coatings, elaborated by thermal spraying flame, from results of numerical simulation.....	231
Projection parameters of zirconia-alumina-ceria coatings made by thermal projection of oxyacetylene, based on numerical simulation .....	232
Sputtering of the 1020 AISI steel in abnormal glow discharge.....	234
Synthesis of a-C:H layer via chemical vapor deposition.....	235
Wear and corrosion behavior of Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -45% TiO <sub>2</sub> coatings produced by flame thermal projection.....	236
Wear evaluation of flank in burins of steel HSS implanted with nitrogen and titanium ions .....	237
<b>Thin Films and Nanomaterials - TFN.....</b>	<b>238</b>
Aharonov-Bohm effect on the exciton spectra in type-II nanocones .....	239
Deposition and characterization of MoS <sub>2</sub> and WS <sub>2</sub> thin films obtained by magnetron sputtering for solid lubrication applications on industrial parts.....	240
Design and evaluation of a biosand filter in the removal of total coliforms for the treatment of surface waters of human consumption.....	242
Detailed study of the magnetic behaviour at low scale in La <sub>2/3</sub> Sr <sub>1/3</sub> MnO <sub>3</sub> .....	244
Dynamic study about of molecular self-assembly over substrates Au (1 1 1) for designing nanosensors of superficial plasmon.....	246
Effect of activation conditions on functional groups, textural properties and electrochemical performance of activated carbons from agricultural waste .....	247
Effect of annealing process on physical properties of Hg <sub>1-x</sub> Cd <sub>x</sub> Se films .....	250
Effect of pH and chloroauric acid concentration on the geometry of gold nanoparticles obtained by photochemical synthesis.....	251
Electric dipole moment of magnetoexciton in weakly coupled concentric quantum rings .....	253
Evaluation of the effect of nanoclays in membrane of copolymer SEPS for removal of carbon dioxide of emissions of cement industry .....	255
Improvement in the electrical conductivity of transparent films made with metallic nanowires .....	257
Interfacial coupling in multiferroic BiFeO <sub>3</sub> and ferromagnetic La <sub>2/3</sub> Sr <sub>1/3</sub> MnO <sub>3</sub> thin films .....	259
Mesoporous silicon oxide films and its utility as a Template in obtaining nano-structured conductor polymers.....	260
Microwave-hydrothermal synthesis of carbon nanostructures for functionalization with horseradish peroxidase (armoracia rusticana) .....	262
Scanning electron microscopy of heat treated TiO <sub>2</sub> nanotubes arrays obtained by anodic oxidation .....	265
Semiconductor behaviour and optical properties of titanium and niobium oxide thin films.....	266

Structural and optoelectronic characterization of bismuth-titanium-oxygen thin films deposited on AISI 316L substrates .....	268
Synthesis of Diamond-like Carbon (DLC) protective coatings using a modified pulsed-DC PECVD deposition system.....	269
Systematic study of the influence of the deposit variables in the morphological and topographic properties of copper coatings obtained by the resistive thermal evaporation technique.....	271
<b>Wear and Corrosion/Oxidation - WCO</b> .....	273
Effect of CO <sub>2</sub> temperature and concentration in the performance of citric acid as an inhibitor of inhibitors of CaCO <sub>3</sub> .....	274
Effect of salt concentration on the formation of fouling deposits on carbon steel from Colombian heavy crude oil.....	275
Effect of the microstructure of AZ31 magnesium alloy on CaP coatings morphology deposited by means of plasma electrolytic oxidation PEO .....	276
Effect of zinc thickness on corrosion film breakdown of Colombian galvanized steel.....	278
Effects of oxidation-nitridation in the presence of water vapor on ASTM A335 P92 steel using SEM-EDS and XPS characterization techniques .....	279
Electrochemical characterization of corrosion in materials of earthing systems, simulated conditions of synthetic soils with characteristics of local soils .....	281
Electrochemical techniques implementation for corrosion rate measurement in funtion of humidity level in grounding systems (copper and stainless steel) in soil samples from Tunja (Colombia).....	283
Evaluation of corrosion products formed by sulphidation as inhibitors of the naphthenic corrosion of AISI-316 steel.....	285
Isothermal oxidation in the presence of water vapor in ASTM A335 P92 steel using SEM-EDS and XPS.....	287
Methodology for evaluation of corrosion damage obtained during combustion process in a boiler. Case study: Ferritic steel ASTM A335 P91 .....	289
Resistance to erosive wear of alumina coatings .....	291
Study of oxidation and nitridation environments in typical corrosion atmospheres from a refinery furnace at high temperatures: Case study, ferritic steel ASTM A335 P91.....	293
Use of vegetable extract as corrosion coating on steel rebars in a saline environment .....	295

**Invited Keynote Speaker**

**Conferencista Magistral Invitado**

## What are the benefits of nanofilm and coatings research partnerships?

## ¿Cuáles son los beneficios de las colaboraciones de investigación en nanopelículas y recubrimientos?

**J L Endrino Armenteros<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Cranfield University, Cranfield, Bedfordshire, United Kingdom

E-mail: [j.l.endrino@cranfield.ac.uk](mailto:j.l.endrino@cranfield.ac.uk)

**Abstract.** New generations of functional and high-temperature coatings which allow for a wide variety of solutions are today in a high demand. This presentation will highlight how the development of protecting turbine blade materials and coatings at Cranfield University for improved engine efficiency have found suitable applications in other sectors where extreme heat was involved such as concentrating solar power and the machining of difficult to cut materials. The beneficial impact in the search of these new opportunities within the industrial surface engineering community will be underlined. This talk will also highlight the importance of international research partnerships in the development of new thin film nanomaterials in the search for new opportunities in the energy, medical and automotive sectors and how coating manufacturing and characterisation partnerships are also needed to reach new heights.

**Resumen.** Las nuevas generaciones de revestimientos funcionales y de alta temperatura que permiten una amplia variedad de soluciones están hoy en gran demanda. En esta presentación se destacará cómo los materiales protectores utilizados en las palas o alabes de las turbinas y los recubrimientos desarrollados en la Universidad de Cranfield para mejorar la eficiencia del motor han encontrado aplicaciones adecuadas en otros sectores donde el calor extremo está involucrado como en la concentración de energía solar y en el mecanizado de materiales difíciles de cortar. El impacto benéfico en la búsqueda de estas nuevas oportunidades dentro de la comunidad industrial de ingeniería de superficie será resaltado. En ésta conferencia también se enfatizará sobre la importancia de las cooperaciones internacionales de investigación en el desarrollo de nuevos nanomateriales de película delgada en la búsqueda de nuevas oportunidades en los sectores energético, médico y automovilístico y cómo las colaboraciones en la fabricación y caracterización de recubrimientos son también necesarias para alcanzar nuevos avances.



# Industrial applications of magnetron sputtering coatings and processes: DLC and HIPIMS

## Aplicaciones industriales de recubrimientos por sputtering magnetrón: DLC y HIPIMS

I Fernández Martínez<sup>1,2</sup> and A Wennberg<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Nano4Energy SL, Madrid, Spain

<sup>2</sup> hipV AB, Stocksund, Sweden

E-mail: [ivan.fernandez@nano4energy.eu](mailto:ivan.fernandez@nano4energy.eu)

**Abstract.** In today's society there is a rapidly increasing demand of materials and new functions of materials. This is clearly shown in the exponential need for surface modifications and coatings, anything from a couple of millimetres of regular paint to atom thin layers of semiconductors. The number of applications is almost unlimited: thin film coatings are utilized in a wide variety of fields and products that exist around us, such as anti-reflective coatings in lenses, aluminized plastic for food packaging, cutting tools for metal working or transparent conductive oxides in touch screens. There are many types of coating techniques but when it comes to thin film coatings, magnetron sputtering is the most commonly used in the industry. The presentation will focus in two different technologies, Diamond-Like Carbon (DLC) and High Power Impulse Magnetron Sputtering (HIPIMS). DLC have been recognized as one of the most valuable engineering materials for various industrial applications including manufacturing, transportation, biomedical and microelectronics. Among its properties, DLC has good frictional behaviour combined with high surface hardness, offering an elevated protection against abrasive wear. On the other hand, HIPIMS is characterized by the high ionization degree of the vaporized material due to the high instantaneous power applied to the plasma, in the range of the MW peak power, which brings a new level of control to the process. This generates great benefits such as: drastically reducing surface defects, extremely dense films, high hardness surfaces with excellent adhesion or low surface roughness. The films are also more homogenous and less sensitive for complex shapes.

**Resumen.** En la sociedad de hoy en día existe una creciente demanda de materiales y nuevas funcionalidades de los mismos. Este hecho se muestra claramente en la necesidad exponencial de nuevos tratamientos superficiales y recubrimientos, desde un par de milímetros de pintura hasta láminas delgadas semiconductores de escala atómica. El número de aplicaciones es casi ilimitado: los recubrimientos de lámina delgada se utilizan en una amplia variedad de campos y productos que existen alrededor de nosotros, tales como recubrimientos antirreflectantes en lentes, plástico recubierto de aluminio para envasado de alimentos, herramientas de corte para trabajar metales u óxidos conductores transparentes en pantallas táctiles. Hay muchos tipos de técnicas de recubrimiento, pero cuando se trata de recubrimientos de lámina delgada, el "sputtering" magnetrón es el más utilizado en la industria. La presentación se centrará en dos tecnologías diferentes, Diamond-Like Carbon (DLC) y High Power Impulse Magnetron Sputtering (HIPIMS). DLC han sido reconocidos como uno de los materiales de ingeniería más

valiosos para diversas aplicaciones industriales, incluyendo fabricación, transporte, biomédica y microelectrónica. Entre sus propiedades, DLC posee un bajo coeficiente de fricción combinado con alta dureza, ofreciendo una protección elevada contra el desgaste abrasivo. Por otra parte, HIPIMS se caracteriza por el alto grado de ionización del material vaporizado debido a la alta potencia instantánea aplicada al plasma, en el rango de MW de potencias pico, lo que aporta un nuevo nivel de control al proceso. Esto genera grandes beneficios como: reducir drásticamente los defectos superficiales, se generan láminas delgadas extremadamente densas, alta dureza, excelente adherencia o baja rugosidad superficial.

## Design of nano/microcrystalline diamond coating at cemented carbide WC-6% Co tools

## Diseño de un recubrimiento de diamante nano/microcristalino en herramientas de carburo cementado WC-6%Co

E E Ashkinazi<sup>1,2</sup>, P A Tsygankov<sup>1,6</sup>, R A Khmel'nitsky<sup>1,3;5</sup>, V S Sedov<sup>1,2</sup>, D N Sovyk<sup>1,2</sup>, A A Khomich<sup>1</sup>, A V Khomich<sup>1,2,4</sup>, V D Vinogradov<sup>6,1</sup>, R Chelmodeev<sup>6</sup> and V G Ralchenko<sup>1,2,7</sup>

<sup>1</sup> Prokhorov General Physics Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

<sup>2</sup> National Research Nuclear University, Moscow, Russia

<sup>3</sup> Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

<sup>4</sup> Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

<sup>5</sup> Troitsk Institute for Innovation and Fusion Research, Moscow, Russia

<sup>6</sup> Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

<sup>7</sup> Harbin Institute of Technology, Harbin, China

E-mail: tsyg@bmstu.ru

**Abstract.** The tungsten carbide tools with a diamond coating are at the forefront of modern research of hard coatings and are highly sought after by industry. In this paper step by step the stages of forming of the highly adhesive diamond coating with a thickness up to 15 $\mu$ m on the surface of a cemented carbide WC-6% Co tool are considered. The problems of preparing the surface of tungsten carbide, the creation of high-adhesion barrier layers, preventing the diffusion of cobalt into the growing diamond, and the conditions for the formation of a gradient nanocrystalline/microcrystalline diamond coating are discussed. Various competing production methods, technological approaches and equipment are discussed. The results of tests of a diamond tool are presented.

**Resumen.** Las herramientas de carburo de tungsteno con un recubrimiento monocapa de diamante están a la vanguardia de la investigación moderna de recubrimientos duros y son muy buscados por la industria. En este trabajo se consideran paso a paso las etapas de formación del recubrimiento de diamante altamente adhesivo con un espesor de hasta 15 $\mu$ m sobre la superficie de una herramienta de carburo cementado WC-6% Co. Se discuten los problemas de preparación de la superficie de carburo de tungsteno, la creación de capas barrera de alta adherencia, la prevención de la difusión de cobalto en el diamante en crecimiento y las condiciones para la formación de un recubrimiento de diamante nanocristalino/microcristalino en gradiente. Se discuten diversos métodos de producción, enfoques tecnológicos y equipos competidores. Finalmente, se presentan los resultados de las pruebas de una herramienta con recubrimiento de diamante.

## Processing of cellular metals by molten metal infiltration

## Procesamiento de metales celulares por infiltración de metal líquido

E M Castrodeza<sup>1</sup>

<sup>1</sup> COPPE/Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

E-mail: castrode@metalmat.ufrj.br

**Abstract.** Cellular metals are the subject of numerous recent studies due to their ability to combine good mechanical and physical properties with low density. That makes these materials very attractive both for structural and functional applications. Cellular metals can be produced by several processes, including molten metal infiltration of a leachable bed of solid particles, also known as space holder. A recent work introduced the use of amorphous SiO<sub>2</sub> (silica-gel) beads as space holder for open-cell Cu-based foam processing through molten metal infiltration. Once infiltrated, SiO<sub>2</sub> particles are dissolved by a wet solution of hydrofluoric acid (HF). Unfortunately, this technique is not applicable for processing of steel foams, mainly due to the high melting point of steels (~1500°C). For overcoming this limitation, it was proposed to use beta-SiC as space holder. SiC can withstand the infiltration efforts till 1800°C and can be also dissolved by aqueous HF. Following this route highly homogeneous dual-phase steel foams featuring opened cell structure were processed. Finally, there is interest in developing porous materials based on shape memory alloys (SMAs) because they would be light materials able to almost reversibly stand large deformations while absorbing an important amount of energy. Some alternatives are being explored. Among them, porous Cu-based SMAs such as Cu–Al–Mn or Cu–Zn–Al. Aiming at characterizing the compressive behavior of these new materials, a porous shape memory Cu–Zn–Al alloy was prepared. The results indicate that Cu–Zn–Al foams are promising candidates for interesting applications such as damping materials.

**Resumen.** Metales celulares tienen la capacidad de combinar buenas propiedades mecánicas o físicas con baja densidad, lo que los hace candidatos para aplicaciones estructurales o funcionales. Los metales celulares (o espumas metálicas) pueden ser producidos por diferentes técnicas, que incluyen la infiltración de metal líquido de un lecho de partículas sólidas, posteriormente disueltas. Una técnica relativamente reciente utiliza partículas regulares o irregulares de SiO<sub>2</sub> amorfo (silica-gel) para el procesamiento de espumas de aleaciones de Cu. Una vez infiltradas, las partículas de SiO<sub>2</sub> son disueltas por una solución acuosa de ácido fluorhídrico (HF). Infelizmente esta técnica no es adecuada para el procesamiento de aceros, por su alto punto de fusión (~1500°C). Esta limitación puede ser evitada mediante el uso de partículas de carbonato de silicio (SiC), las cuales pueden soportar temperaturas de procesamiento de aproximadamente 1800°C, siendo también disueltas por HF acuoso. Espumas muy homogéneas de acero dual phase han sido obtenidas mediante esta técnica. Finalmente, existe interés en desarrollar metales celulares con memoria de forma (SMA) porque pueden ser obtenidos materiales que soportan grandes deformaciones de forma reversible, absorbiendo al mismo tiempo gran cantidad de energía. Algunas alternativas están siendo investigadas, entre las cuales el procesamiento de aleaciones Cu–Al–Mn o Cu–Zn–Al. Para caracterizar mecánicamente sus propiedades en compresión, espumas metálicas de Cu–Zn–Al con memoria

de forma fueron procesadas. Los resultados indican a esos materiales como candidatos para aplicaciones como resorte-amortiguador.

## Modelling strategies for carbon polymer nanocomposites

## Estrategias de modelizado de nanocomposites de carbono

J M Muñoz-Guijosa<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España

E-mail: [jmguijosa@etsii.upm.es](mailto:jmguijosa@etsii.upm.es)

**Abstract.** Given the excellent mechanical, thermal, electrical and electronic properties of graphene and carbon nanotubes, carbon nanocomposites have potentially, for some very small fill percentages, macro-scale excellent properties. However, and especially as far as mechanical properties are concerned, the characteristics that have been obtained to date are far from those theoretically obtainable. In addition to the aspect ratio, dispersion and misalignment, there is a very important parameter to explain this difference: the transfer of stresses between the nanoparticle and the matrix at its interface. This paper will describe the modelling of such interfacial transfer of efforts, which allows quantifying the influence of this on the macro scale, as well as the integration of the parameters at nano and macro-scale.

**Resumen.** Dadas las excelentes propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas y electrónicas del grafeno y los nanotubos de carbono, los nanocomposites de carbono deberían tener potencialmente, para unos porcentajes de relleno muy pequeños, unas propiedades excelentes a escala macro. Sin embargo, y especialmente en lo que a propiedades mecánicas se refiere, las características que se han obtenido hasta la actualidad distan de las teóricamente obtenibles. Además de la relación de aspecto, la dispersión y la desalineación, existe un parámetro muy importante para explicar esta diferencia: la transferencia de esfuerzos entre la nanopartícula y la matriz en su interfaz. En esta ponencia se describirá la modelización de la transferencia interfacial de esfuerzos, que permite cuantificar la influencia de ésta en la escala macro, así como la integración de los parámetros a escala nano y macro.

## Electrochemical impedance spectroscopy (EIS) in micrometric spaces for the characterization of nanomaterials

## Espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS) en espacios micrométricos para la caracterización de nanomateriales

E Méndez Morales<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

E-mail: emendez@fcien.edu.uy

**Abstract.** Nanostructured materials surfaces mimic the surface of biological objects, making their studies of interest in the framework of biomaterials development and surface coverage design for biorecognition. These materials offer micrometric confined spaces within which soluble species may diffuse. Cyclic voltammetry is unable to differentiate between this diffusional phenomenon and surface bound redox behaviour; however, electrochemical impedance spectroscopy allows for a rigorous analysis of this type of diffusion process. In this brief course, electrochemical impedance spectroscopic analysis is applied on a new electrochemical system set-up recently developed by our group that substantially eliminates the iR drop resulting from badly designed electrochemical set-ups. The results obtained with this system yields new information on the electrochemical interface in micro and submicrometric environments.

**Resumen.** Los materiales nanoestructurados ofrecen superficies similares con diferentes objetos biológicos, por lo que resultan de interés en el desarrollo de biomateriales y en el recubrimiento de superficies para modular los fenómenos de bioreconocimiento. Entre los nuevos fenómenos que surgen de estos materiales, se encuentra la difusión en espacios confinados que involucran espesores difusionales dentro del rango micrométrico. La voltamperometría cíclica no es capaz de diferenciar este tipo de difusión del fenómeno de adsorción superficial; pero la espectroscopía de impedancia electroquímica permite un análisis riguroso de este tipo de difusión. En este breve curso, se presentarán los análisis por espectroscopía de impedancia electroquímica empleando un sistema electroquímico recientemente desarrollado en nuestro grupo, que elimina sustancialmente los fenómenos de caída óhmica resultantes del diseño geométrico de la celda. Las conclusiones que se desprenden de este estudio aportan una nueva visión de la interface electroquímica en ambientes micro y submicrométricos.

## Advanced optical spectroscopy applied to nanomaterials science & engineering

## Espectroscopía óptica avanzada aplicada a la ciencia e ingeniería de materiales y nano-materiales

I A Silva Carvalho<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Horiba Instruments, São Paulo, Brazil

E-mail: igor.carvalho@horiba.com

**Abstract.** Horiba Company has a long tradition in innovation and scientific background on optical spectroscopy applied to materials, nanomaterials science and engineering. In latest years, a new concept of instrumentation has been developed and released by the company. Automation, fully achromatic from sample to detector, broad detection range (UV-VIS-NIR), Innovative Frequency Domains, Transmission Raman/Fluorescence and very unique configurations for AFM/RAMAN coupling and FLIM (Fluorescence Imaging) has been released as a result of research and improvement from customers support engineering team.

Some examples of applications are measurements of lattice modes of superconductors in nanoscale, longitudinal acoustic modes of nanopolymers (LAM), boson peaks of glassy structures, biomaterials vibrational modes and information of pharmacy compounds polymorphism. For AFM-RAMAN coupling, all traditional AFM modes are available, as well as co-localized Raman-AFM, SNOM, and TERS, in very user-friendly automated configurations. Concerning the AFM-RAMAN coupling, HORIBA has developed a unique and integrated solution. Compact, fully automated and easy-to-use, the “XploRA Nano” and “HR Evo Nano” products concentrate the power of AFM-Raman into an affordable yet full-featured package, making TERS imaging with a resolution down to 10nm a reality for all. Especially efficient for probing 2D materials, we report results of TERS characterization of graphene oxide and 2D TMDCs like MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub>.

For Biomaterials and nanomedicine, applications examples can be the measurement of intracellular pH, Ca<sup>2+</sup> ratio, oxygen saturation, in vivo monitoring intrinsic proteins, such as NADH, FLIM with FRET (Föster Resonance Energy Transfer) – protein interactions with high spatial and temporal resolution. For lasers, plasmonic and Photonics, HORIBA has a unique range of spectroscopy solutions combining top edge components (monochromators, detector, light sources) designed to any application field. Together new material characterization - quantum dots and potential process control tool for PV production, Ellipsometry is also a top edge technology from HORIBA with innovative systems specially designed for nanostructures coatings measurements able to reach Å, adding to HORIBA portfolio capabilities to measure bandgaps, resistivity, growth rate, corrosion, donors concentration, depolarization rate,



homogeneity, anisotropy, properties x temperature, stress, strain, electric-optical and magnetic-optical coefficients.

**Resumen.** La compañía Horiba tiene una larga tradición en innovación y formación científica en espectroscopía óptica aplicada a la ciencia e ingeniería de materiales y nanomateriales. En los últimos años, un nuevo concepto de instrumentación ha sido desarrollado y lanzado por la empresa. La automatización, totalmente acromática desde la muestra hasta el detector, un amplio rango de detección (UV-VIS-NIR), dominios de frecuencia innovadores, Raman/Fluorescencia de transmisión y configuraciones muy únicas para acoplamiento AFM/RAMAN y FLIM (Fluorescence Imaging) ha sido liberados como un resultado de la investigación y del mejoramiento obtenido desde el equipo de Ingeniería de Soporte al cliente.

Algunos ejemplos de aplicaciones son mediciones de los modos enrejados de superconductores en nanoescala, modos acústicos longitudinales de nanopolímeros (LAM), bosones de estructuras vítreas, modos de vibración de biomateriales e información de polimorfismos en compuestos de farmacia. Para acoplamiento AFM-RAMAN, están disponibles todos los modos AFM tradicionales, así como también el Raman-AFM co-localizado, SNOM y TERS, en configuraciones automatizadas muy fáciles de usar. En cuanto al acoplamiento AFM-RAMAN, HORIBA ha desarrollado una solución única e integrada. Compacto, totalmente automatizado y fácil de usar, los productos “XploRA Nano” y “HR Evo Nano” concentran la potencia de AFM-Raman en un paquete asequible, pero con todas las funciones, haciendo imágenes TERS con una resolución de hasta 10nm. Especialmente eficientes para sondear materiales 2D, reportamos resultados de la caracterización TERS de óxido de grafeno y TMDCs 2D como MoS2 y WS2.

Para Biomateriales y nano-medicina los ejemplos de aplicaciones pueden ser la medición del pH intracelular, la relación de Ca<sup>2+</sup>, la saturación de oxígeno, la monitorización in vivo de proteínas intrínsecas, como son NADH, FLIM con FRET (Föster Resonance Energy Transfer) - interacciones de proteínas con alta resolución espacial y temporal. Para láseres, plasmónica y fotónica, HORIBA dispone de una gama única de soluciones espectroscópicas que combinan componentes de línea superior como (monocromadores, detectores, fuentes de luz, etc) diseñados para cualquier campo de aplicación. Junto con la caracterización de nuevos materiales - puntos cuánticos y herramientas potenciales de control de procesos para la producción fotovoltaica, la Elipsometría es también una tecnología de punta de HORIBA con sistemas innovadores especialmente diseñados para mediciones de recubrimientos de nanoestructuras capaces de alcanzar Å, añadiendo a al portafolio de HORIBA capacidad de medir bandgaps, resistividad, tasa de crecimiento, corrosión, concentración de donners, tasa de despolarización, homogeneidad, anisotropía, propiedades a X temperatura, tensión, deformación, coeficientes electro-ópticos y magnético-ópticos.

## Nanoparticulate ceramic materials for water decontamination and agribusiness applications

## Materiales cerámicos nanoparticulados para aplicaciones en la descontaminación del agua y agronegocios

E C Paris<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Embrapa Instrumentação, National Nanotechnology Laboratory for Agribusiness, São Carlos, São Paulo, Brazil

E-mail: elaine.paris@embrapa.br

**Abstract.** The application of nanoparticulate materials has gained space in the environmental and agrarian sectors, showing promising results. Ceramic nanoparticles obtained under conditions of synthesis and processing that ensure purity, phase formation reproducibility and morphological control, present great scientific and technological interest for many applications. In this context, the development/improvement of the recoverable and reusable nanomaterials for water decontamination are candidates for this problem remediation. Processes involving semiconductor nanoparticles in heterogeneous photocatalysis, and adsorption from mesoporous materials are favourable for this purpose. However, after the process finalization, methods for removal of these materials need to be improved. The use of magnetic nanoparticles or the immobilization in polymeric fibers may be options for solution of this situation. Another area of application that deserves prominence of ceramic nanoparticles involves agribusiness. Nanoparticles can be used to potentiate the mineral nutrients provided to the soil, by means of the particle size and crystallization process control to increase the solubility. The process efficacy can be associated with conditioning methods of these nanoparticles in biodegradable polymers, in order to adjust the nutrient supplied.

**Resumen.** La aplicación de materiales nanoparticulados ha ganado espacio en los sectores ambiental y agrario, mostrando resultados prometedores. Las nanopartículas cerámicas obtenidas en condiciones de síntesis y procesamiento que aseguran la pureza, la reproducibilidad de la formación de fases y el control morfológico, presentan gran interés científico y tecnológico para muchas aplicaciones. En este contexto, el desarrollo/mejora de los nanomateriales recuperables y reutilizables para la descontaminación del agua son candidatos para la remediación de este problema. Los procesos que implican nanopartículas semiconductoras en fotocatalisis heterogénea y adsorción sobre materiales mesoporosos son favorables para este propósito. No obstante, después de la finalización del proceso, los métodos para retirar estos materiales necesitan ser mejorados. El uso de nanopartículas magnéticas o la inmovilización en fibras poliméricas pueden ser opciones para la solución de esta situación. Otra área de aplicación que merece la prominencia de las nanopartículas cerámicas implica la agroindustria. Las nanopartículas se pueden utilizar para potenciar los nutrientes minerales proporcionados al suelo, mediante el control del tamaño y del proceso de cristalización para aumentar la solubilidad. La

eficacia del proceso puede asociarse con métodos de acondicionamiento de estas nanopartículas en polímeros biodegradables, con el fin de ajustar el nutriente suministrado.

## Internal corrosion in the oil and gas industry

### Corrosión interna en la industria de petróleo y gas

L Gil Lozada<sup>1</sup>

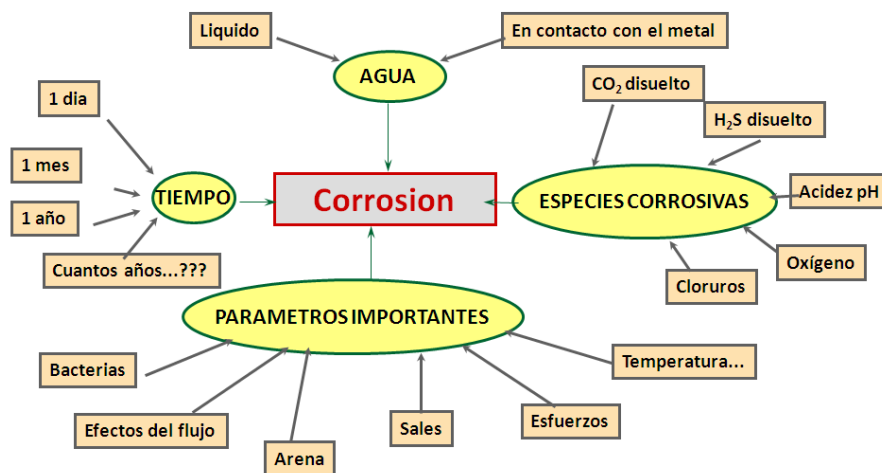
<sup>1</sup> Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Puerto Ordaz, Venezuela

E-mail: lindaegil@gmail.com , lgil@unexpo.edu.ve

**Abstract.** The effects of corrosion on industrial installations and equipment produce annual losses that reach very important cost; In industrialized countries has been valued at 3% of GDP. The oil industry is complex, with demanding exploration and production techniques, which together with the environment make it easier that materials failed. Statistics indicate that of all the failures that occur in the operations of the oil industry the most important is the corrosion with 33% of the cases, being the same one of the main problems that affects the useful life of the equipment and installations of the industry of petroleum, causing deterioration of metallic materials at each stage associated with the oil industry such as exploration, drilling, production, transportation and refining. Structures, equipment and piping are generally affected by external and internal corrosion phenomena. CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, salts like chlorides, are the most important corrosive species, which are in equilibrium with the three phases, oil, water and gas. Also the presence of bacteria is an important factor to consider. Oxygen, which plays an important role in corrosion, is not normally present in the formations, it is at the drilling stage that the contaminated sludges with oxygen are initially introduced. Water and carbon dioxide whether produced or injected by secondary recovery can cause severe corrosion of the completion pipeline. Completion and surface pipes can also suffer wear/erosion problems due to high production speeds and/or production sands. The previously exposed corrosion situations, with the added complications of high temperatures, pressures and stresses involved in the drilling and production stages require the experience of a corrosion engineer, an increasingly important professional in the industry. The present course will outline the most common and concurrent types of internal corrosion in the oil industry, as well as some of the main technologies used as methods of corrosion control.

**Resumen.** Los efectos de la corrosión sobre instalaciones y equipos industriales producen anualmente pérdidas que llegan a cifras muy importantes; en los países industrializados se ha valorado en el 3% del PIB. La industria del petróleo es compleja, con técnicas de exploración y producción exigentes, lo cual aunado al ambiente facilita que los materiales puedan fallar. Estadísticas indican que de todas las fallas que ocurren en las operaciones de la industria la más importante es la corrosión con el 33% de los casos, siendo la misma uno de los principales problemas que afecta la vida útil de los equipos e instalaciones de la industria petrolera ocasionando el deterioro de los materiales metálicos en cada etapa asociada a la industria petrolera como son exploración, perforación, producción, transporte y refinación. Por lo general, las estructuras, equipos y tuberías se ven afectados por los fenómenos de corrosión externa e interna. El CO<sub>2</sub>, el H<sub>2</sub>S, las sales como cloruros, son las especies corrosivas más importantes, las cuales están en equilibrio con las tres fases, petróleo, agua y gas. Así mismo la presencia de

bacterias es un factor importante a considerar. El oxígeno, que juega un papel importante en la corrosión, no está presente normalmente en las formaciones, es en la etapa de perforación que los lodos contaminados con oxígeno son inicialmente introducidos. El agua y el dióxido de carbono ya sea producidos o inyectados por recuperación secundaria pueden causar corrosión severa de la tubería de completación. Las tuberías de completación y las de superficie también pueden sufrir problemas de desgaste/erosión por las altas velocidades de producción y/o por las arenas de producción. Las situaciones de corrosión anteriormente expuestas, con las complicaciones añadidas de las altas temperaturas, presiones y esfuerzos involucrados en las etapas de perforación y de producción, requiere la experiencia de un ingeniero de corrosión, una figura cada vez más importante en la industria. En el presente curso se expondrán los tipos de corrosión interna más comunes y concurrentes en la industria petrolera, así como algunas de las principales tecnologías usadas como métodos de control de la corrosión.



**Figura 1.** Factores que controlan la corrosión en la industria de Petróleo y Gas.

**Additive Manufacturing - AM**

**Fabricación aditiva - AM**

## Improving of strength and durability in commercial cement mortar adding cladodes of Nopal (*opuntia ficus indica*)

## Mejora de la resistencia y durabilidad en morteros de cemento comercial adicionando cladodios de Nopal (*opuntia ficus indica*)

J A Gómez Cuaspud<sup>1</sup>, C E Martínez Suarez<sup>1</sup> and C G Hernández Carrillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: carlosgabriel.hernandez@uptc.edu.co

**Abstract.** At present, there are several components that favour the mechanical resistance and durability of concretes and cements, through the use of additives that contribute to improve these properties, especially those that contribute to reduce the impacts on the environment. Although in Colombia cement is one of the most used construction materials, the current classification of these by performance, makes possible the use of new additives that contribute to the technological development in the cement industry and in the construction of more efficient systems. In agreement with the above, the present work has focused on the development of a methodology for the incorporation of Nopal (*opuntia ficus indica*), as an additive in the design of more robust cement mixtures. Thus, in order to determine the effect of nopal in Colombian cements, initially, several plant samples of this plant, mainly located in the urban and rural area of the city of Tunja, were characterized by infrared spectroscopy techniques (FT-IR) And elemental chemical composition, determining a compositional uniformity of these samples related to a high concentration of long chain polysaccharides (3-5% by weight) and protein components (1-4% by weight), which favours from the point of view structural the development of plastification processes of cement mixtures. The initial structural characterization of commercial cement samples was performed by XRD, scanning electron microscopy (SEM) and XRF (fluorescence), determining that there is in fact an important compositional variability mainly related to the minor elements of the cements, besides incorporating own morphological characteristics in each particular case. Once the preliminary characterization stage was carried out, the methodology for the incorporation of Nopal into commercial concrete mixtures of type UG in the form of pulverized with concentrations of 0, 1, 2 and 5% (w/w). The time of setting, normal consistency and fluidity of the mortars were evaluated by penetration techniques and flow table in the fresh state, determining an initial effect of decreasing the fluidity, which modified the viscosity and increased set times in each case. Thus, improving the workability of systems. A decrease in the water absorption in each specimen was determined by reducing the porosity of the materials of control values by about 40-50% to values of 17-30%, measured through nitrogen adsorption isotherms (BET), The percentage of moisture and Density, absorption and voids, determining an increase in the mechanical resistance of the systems that incorporated nopal. These results demonstrate the effectiveness of the proposed methodology and determine an advance in obtaining more robust and low cost systems in the elaboration of civil structures with reduction of raw material.

**Resumen.** Actualmente son diversos los componentes que favorecen la resistencia mecánica y durabilidad de los concretos y cementos, mediante el uso de aditivos que contribuyen a mejorar estas propiedades, máxime aquellos que contribuyen a reducir los impactos en el medio ambiente. Si bien en Colombia el cemento es uno de los materiales de construcción más utilizados, la actual clasificación de estos por desempeño, posibilita el empleo de nuevos aditivos que aportan al desarrollo tecnológico en la industria cementera y en la construcción de sistemas más eficientes. En concordancia con lo anterior, el presente trabajo se ha centrado en el desarrollo de una metodología para la incorporación de Nopal (*opuntia ficus indica*), como aditivo en el diseño de mezclas de cemento más robustas. Así, con el fin de determinar el efecto del nopal en cementos colombianos, inicialmente, se caracterizaron diversas muestras vegetales de esta planta, principalmente localizada en la zona urbana y rural de la ciudad de Tunja, mediante técnicas de espectroscopía infrarroja (FT-IR) y composición química elemental, determinando una uniformidad composicional de estas muestras relacionadas con una alta concentración de polisacáridos de cadenas largas (3-5% en peso) y componentes proteicos (1-4% en peso), lo cual favorece desde el punto de vista estructural el desarrollo de procesos de plastificación de las mezclas de cemento. La caracterización estructural inicial de las muestras de cemento comercial, se realizó mediante difracción de rayos X (XRD), microscopía electrónica de barrido (SEM) y fluorescencia de rayos X (XRF), determinando que en efecto existe una variabilidad composicional importante principalmente relacionada con los elementos minoritarios de los cementos, además de incorporar unas características morfológicas propias en cada caso particular. Una vez realizada la etapa preliminar de caracterización, se procedió al desarrollo de la metodología para la incorporación de Nopal en las mezclas de cemento comercial tipo UG en forma de pulverizado con concentraciones de 0, 1, 2 y 5 % (w/w). Los tiempos de fraguado, consistencia normal y fluidez de los morteros se evaluaron mediante técnicas de penetración y mesa de flujo en estado fresco, determinando un efecto inicial de disminución de la fluidez, que modificó la viscosidad e incrementó los tiempos de fraguado en cada caso, mejorando así la trabajabilidad de los sistemas. Se determinó una disminución en la absorción de agua en cada probeta, reduciendo la porosidad de los materiales de valores de control alrededor de 40-50% hasta valores de 17-30%, medidas a través de isothermas de adsorción de nitrógeno (BET), porcentaje de humedad y densidad, absorción y vacíos, determinando un aumento en la resistencia mecánica de los sistemas que incorporaron nopal. Estos resultados, demuestran la efectividad de la metodología propuesta y determinan un avance en la obtención de sistemas más robustos y de bajo costo en la elaboración de estructuras civiles con reducción de materia prima.



## Mechanical properties of ceramic structures based on triply periodic minimal surface (TPMS) processed by 3D printing

## Propiedades mecánicas de estructuras cerámicas basadas en superficies minimales triplemente periódicas (TPMS) procesadas mediante impresión 3D

J A Ramirez<sup>1</sup>, C Paucar<sup>1</sup>, C García<sup>1</sup>, S Ocampo<sup>1</sup> and S Restrepo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

Email: socampo@unal.edu.co

**Abstract.** Repair of tissues and organs has been the main goal of the surgery since ancestral times. Since the 1990s, the main goal of tissue engineering has been the repair, using porous scaffolds that serve as a three-dimensional template for the initial fixation of cells and subsequent tissue formation both in vitro and in vivo. A scaffold must have specific characteristics of porosity, interconnectivity, surface area, pore volume, surface tortuosity, permeability and mechanical properties, which makes very complex its design, processing, and characterization. Inspired by nature, triply periodic minimal surfaces (TPMS) have emerged as an alternative for the manufacture of porous pieces with design requirements, such as scaffolds for tissue repair. In the present work, we used the technique of 3D printing to obtain ceramic structures with Gyroid, Schwarz Primitive Surface and Neovius Surface shapes, three TPMS that fulfill the geometric requirements of a bone tissue scaffold. The main objective of this work is to compare the mechanical properties of ceramic pieces of three different forms of TPMS printed in 3D using a commercial ceramic paste. In this way, it will be possible to clarify which is the TPMS with more appropriate characteristics to construct scaffolds of ceramic materials for bone repair. A dependence of the mechanical properties of the geometry was found being the Primitive Surface of Schwarz the poorer mechanical properties.

**Resumen.** La reparación de tejidos y órganos ha sido el principal objetivo de la cirugía desde tiempos ancestrales. La ingeniería de tejidos, desde la década de los noventa se ha trazado como principal objetivo la reparación, utilizando andamios porosos que sirvan como una plantilla tridimensional para la fijación inicial de células y posterior formación de tejidos tanto in vitro como in vivo. Un andamio debe tener características específicas de porosidad, interconectividad, área superficial, volumen de poro, tortuosidad de la superficie, permeabilidad y propiedades mecánicas, que hace complejo su diseño, conformado y caracterización. Inspiradas en la naturaleza, las superficies minimales triplemente periódicas (TPMS) han emergido como una alternativa para la fabricación de piezas porosas con exigencias de diseño, como es el caso de los andamios para reparación de tejidos. En el presente trabajo, utilizamos la técnica de la impresión 3D para obtener estructuras cerámicas con forma de Giroide, Superficie Primitiva de Schwarz y Superficie de Neovius; tres TPMS que llenan los requisitos geométricos de un andamio tisular de hueso. El objetivo principal es comparar las propiedades mecánicas de piezas cerámicas de tres formas diferentes de TPMS impresas en 3D utilizando una pasta cerámica comercial. De esta

manera será posible tener claridad sobre cuál es la TPMS con características más apropiadas para construir andamios de materiales cerámicos para reparación ósea. Se encontró una dependencia de las propiedades mecánicas con la geometría siendo la Superficie Primitiva de Schwarz la de más pobres propiedades mecánicas.

# Manufacturing of substrates with nanofillers of copper and oxide graphene

## Fabricación de sustratos con aditivos de cobre y óxido de grafeno

E D V-Niño<sup>1,3</sup>, J L Endrino Armenteros<sup>2</sup> and A Díaz Lantada<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España

<sup>2</sup> Cranfield University, Cranfield, United Kingdom

<sup>3</sup> Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia

E-mail: deydannv@gmail.com

**Abstract.** The present research study consists of manufacture devices of various geometric shapes and mass functionalization, with and without additives (Copper Nanowires, graphene oxide and lyophilized graphene oxide in Isopropyl Alcohol) at different concentrations (2.5%, 5%, and 10%) by means of additive manufacturing, using the laser stereolithography technique (SLA) in FormLabs 3D Form 1+ printer. The substrates were modelled in a computer aided design (CAD) software and later were manufactured, layer by layer with a resolution of the layer thickness of 100 microns, in "clear" type commercial photopolymer epoxy resin (a mixture of oligomers, methacrylate monomers, and photoinitiators). The morphological results show the viability and the potential that the additive manufacturing could have with the functionalized materials.

**Resumen.** El presente estudio de investigación consiste en fabricar dispositivos de diversas formas geométricas y funcionalización en masa, con y sin aditivos (nanohilos de cobre, óxido de grafeno y óxido de grafeno liofilizado en alcohol isopropílico) a diferentes concentraciones (2.5%, 5% y 10%), mediante la técnica de estereolitografía laser (SLA) en la impresora 3D Form 1+ de FormLabs. Los sustratos fueron modelados en un software de diseño asistido por computador (CAD) y posteriormente fueron fabricados, capa a capa con una resolución del espesor de capa de 100micras, en resina epóxica fotopolimérica comercial de tipo "clear" (mezcla de oligómeros, monómeros metacrilatos y fotoiniciadores). Los resultados morfológicos muestran la viabilidad y los potenciales que podría tener la fabricación aditiva con los materiales funcionalizados.

## **Biomedical Coatings - BC**

## **Revestimientos Biomédicos - BCST**

## Nanometrology at Biomaterials Laboratory in Uruguay

## Nanometrología en el Laboratorio de Biomateriales de Uruguay

E Méndez Morales<sup>1</sup> and S Botasini<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de la República. Montevideo, Uruguay

E-mail: emendez@fcien.edu.uy

**Abstract.** Nanometrology is one of the main research topics at Biomaterials Laboratory at the Faculty of Sciences, University of the Republic of Uruguay. This area is of recent development, and as such still faces the scarcity of validated standards, and techniques universally approved. The high reactivity of nanomaterials makes its assessment a particularly difficult challenge. For nanomaterial characterization, a wide variety of techniques are necessary in order to give a global vision of its main characteristics. The Biomaterials Laboratory uses these techniques, employing validated equipment contrasted with the NIST standards available, and protocols approved by NIST and ISO. Among the techniques, we perform UV-Vis-NIR and FTIR spectroscopies, size evaluation by TEM, hydrodynamic sizes by DLS, surface charge as Z potential; colloidal solutions characterization by pH and conductivity, electrochemical characterization by cyclic voltammetry, anodic stripping voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy. We carried out derivatization procedures and bioconjugation of nanoparticles, accompanied by a thorough characterization of the bioconjugated system. Also, stability studies against chemical-induced aggregation by different media are carried out. Our analyses are certified, and we have worked with the industry, biomedical laboratories, and research groups.

**Resumen.** La Nanometrología es una de las líneas principales de investigación en el Laboratorio de Biomateriales de la Facultad de Ciencias de la Universidad de la República de Uruguay. Esta rama de la metrología es de reciente desarrollo, y debe enfrentar todavía la carencia de variedad de estándares internacionalmente validados, y de técnicas universalmente aceptadas. La alta reactividad de los nanomateriales hace de su medida un desafío particularmente difícil. En la actualidad, para poder caracterizar un nanomaterial, es necesario contar con una variedad de técnicas que aportan, en conjunto, una visión global de las principales características del mismo. El laboratorio de Biomateriales cuenta con estas técnicas, llevadas a cabo en equipos validados, y contrastadas con los estándares NIST asequibles, empleando los protocolos aprobados por NIST e ISO. El Laboratorio de Biomateriales ofrece servicios de caracterización por espectroscopías UV-Vis-NIR y FTIR, medidas de tamaño por TEM, tamaños hidrodinámicos por DLS, carga superficial por potencial Z, caracterización de disoluciones coloidales por pH y conductividad, y caracterización electroquímica por voltamperometría cíclica, voltamperometría de redisolución anódica y espectroscopia de impedancia electroquímica. También contamos con las técnicas de derivatización y bioconjugación de nanopartículas, así como de caracterización de los derivados bioconjugados. Realizamos estudios de estabilidad frente a la agregación inducida químicamente por diferentes medios. Nuestros análisis son acompañados de certificaciones, y hemos asesorado a la industria, a laboratorios biomédicos, y a grupos de investigación.

## $\beta$ -tricalcium phosphate coatings on AISI 316 stainless steel for applications as biomaterials

## Recubrimientos de fosfato $\beta$ -tricálcico sobre acero inoxidable AISI 316 para aplicaciones como materiales biocompatibles

G Orozco Hernández<sup>1</sup>, W A Aperador Chaparro<sup>2</sup>, E Ruiz Suárez<sup>2</sup>, C Amaya<sup>3</sup> and J Caicedo<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Universidad ECCI, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

<sup>3</sup> Servicio Nacional de Aprendizaje, Bogotá, Colombia

<sup>4</sup> Universidad del Valle, Cali, Colombia

Email: gorozcoh@ecci.edu.co

**Abstract.** Coatings of biomaterials on metals are widely studied because of their use in implants that are in direct contact with fluids and tissues inside the human body. These coatings have anticorrosive, tribological and biocompatible properties that together enhance the performance in service and biological response of the devices implanted. Biological response plays an important role and it happens mainly in the contact interface between the material and the tissues which it has contact with, this is why the material of which the biocompatible coating is composed has to accomplish with certain strict conditions of bioactivity, osteoconduction, hemotoxicity, cytotoxicity and genotoxicity. In the field of biocompatible coatings stand up the ones based on calcium phosphates due to its worthy behavior against cell adhesion and cells proliferation, this condition is thanks to its porosity and osteoconduction. Among calcium phosphate based compounds there is a special one called  $\beta$ -tricalcium phosphate  $\beta$ -Ca<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> ( $\beta$ -TCP) recognized because it does not produce immune or irritant responses inside the human body. In this work  $\beta$ -TCP coatings were produced on AISI 316 stainless steel by means of magnetron sputtering technique and mechanical behavior, tribological and biocompatible properties were evaluated in order to analyze its possible application as coatings for invasive implants.

**Resumen.** Los recubrimientos de materiales biocompatibles sobre metales son ampliamente estudiados debido al uso de estos últimos en el área de los implantes quirúrgicos. Dichos recubrimientos poseen propiedades anticorrosivas, tribológicas y biocompatibles, cuya sinergia genera un aumento en el rendimiento en servicio y la respuesta biológica de los dispositivos implantados. La respuesta biológica juega un papel muy importante y se da principalmente en la interface material/tejidos, es por esto que la composición química del recubrimiento biocompatible debe cumplir con condiciones estrictas de bioactividad, osteoconducción, hemotoxicidad, citotoxicidad y genotoxicidad. En el campo de los recubrimientos biocompatibles sobresalen los basados en fosfatos de calcio debido a su buen comportamiento frente a la adhesión celular y la proliferación de las células, esto debido principalmente a su carácter poroso y osteoconductor; entre los compuestos de fosfatos de calcio se encuentra el fosfato  $\beta$ -tricálcico  $\beta$ -Ca<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> ( $\beta$ -TCP) reconocido por no producir respuestas inmunes ni

irritantes dentro del cuerpo humano. En este trabajo se produjeron recubrimientos de  $\beta$ -TCP mediante la técnica de magnetron sputtering sobre sustratos de acero inoxidable AISI 316 y se evaluó su comportamiento mecánico, tribológico y biocompatible con el fin de analizar su posible aplicación como recubrimiento en implantes invasivos.

## Biodegradable fluoride-based coatings on the Elektron 21 magnesium alloy as potential use for fabrication of biodegradable orthopedic implants

## Recubrimientos biodegradables base flúor sobre la aleación de magnesio Elektron 21 de uso potencial en la fabricación de implantes ortopédicos biodegradables

S P Mantilla Díaz<sup>1</sup>, F Viejo Abrante<sup>1</sup> and A E Coy Echeverría<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: silviamantilla5@gmail.com

**Abstract.** In recent years, magnesium and its alloys have been considered as revolutionary materials for fabrication of biodegradable orthopedic implants because of its degradability, biocompatibility, and excellent mechanical properties comparable to bone's those. However, their high degradation kinetic on body fluids represents a great disadvantage that has forced to their protection, mainly by the design of biodegradable coatings. In this regard, the most common synthesis route employed is the chemical conversion in different solutions containing fluoride ion (F<sup>-</sup>). This paper presents a collection of research developed within the Development and Technology of New Materials Research Group (GIMAT) at Universidad Industrial de Santander (UIS), Colombia, about the development and performance of biodegradable conversion coatings on the Elektron 21 magnesium alloy (Mg-RE-Zn), employing different fluoride-based solutions such as hydrofluoric acid (HF), ammonium bifluoride (NH<sub>4</sub>HF<sub>2</sub>), and mixtures of sodium fluoride (NaF) and phosphoric acid (H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>). Physicochemical characterization of the coatings was carried out by scanning electron microscopy and energy-dispersive X-ray spectroscopy (SEM-EDX), whereas the biodegradability was evaluated by electrochemical tests and gravimetric tests in Hank solution at 37°C. The experimental results revealed that both the nature and the biodegradable behavior of the coatings resultant depend directly on the microstructure of the alloy and the fluoride-based solution employed during their synthesis.

**Resumen.** En los últimos años, el magnesio y sus aleaciones han sido considerados como materiales revolucionarios en la fabricación de implantes ortopédicos biodegradables debido a su excelente degradabilidad, biocompatibilidad y propiedades mecánicas comparables a las del hueso. Sin embargo, estos materiales presentan una elevada cinética de degradación en medios fisiológicos, lo que hace necesario el diseño de recubrimientos biodegradables para su protección. Entre las alternativas más estudiadas se destacan los recubrimientos base flúor, generalmente sintetizados mediante conversión química, y en los que se han empleado diferentes fuentes de ion flúor (F<sup>-</sup>). En este trabajo se presenta una recopilación de investigaciones desarrolladas dentro del Grupo de Investigación en Desarrollo y Tecnología de Nuevos Materiales (GIMAT) de la Universidad Industrial de Santander (UIS), Colombia, en el campo de



los recubrimientos base flúor sobre la aleación de magnesio Elecktron 21 (Mg-RE-Zn), empleando diferentes medios de síntesis como: soluciones de ácido fluorhídrico (HF), soluciones de bifluoruro de amonio (NH<sub>4</sub>HF<sub>2</sub>), y mezclas de fluoruro de sódico (NaF) y ácido fosfórico (H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>). Los recubrimientos por conversión obtenidos fueron caracterizados microestructuralmente mediante microscopía electrónica de barrido y difracción de rayos X, mientras que la biodegradabilidad se evaluó a través de ensayos electroquímicos y gravimétricos en solución Hank a 37°C. Los resultados experimentales demostraron que tanto la naturaleza como el comportamiento biodegradable de los recubrimientos obtenidos, dependen directamente de la microestructura de la aleación y del medio de tratamiento empleado.

## Chemical and morphological study of bioactive glass coatings submerged in SBF for biomedical applications

## Estudio químico y morfológico de recubrimientos de vidrio bioactivo sumergidos en SBF para aplicaciones biomédicas

J Mina<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Servicio Nacional de Aprendizaje, Cali, Colombia

Email: jaminal3@misena.edu.co

**Abstract.** Bioactive materials correspond to a broad spectrum of materials used in the biomedical industry for dental treatments, orthopedic trauma treatments and other challenges in the medical industry; This project aims to determine the morphological, chemical and bioactive characteristics of bioactive glass coatings deposited by the thermal resistive evaporation technique (TRE) on AISI 316L stainless steel substrates; An elemental analysis of chemical composition was carried out Glow Discharge Optical Emission Spectroscopy (GD-OES), in order to identify the chemical composition of the coatings obtained and the changes caused by the immersion in the simulated Solution of Body Fluids (SBF) taken at different times of immersion, On the other hand, morphological studies were performed in the layers obtained before and after being submitted to the SBF to identify changes in the surface morphology as effect of the ion exchange between coating and the solution; Finally Raman spectroscopy studies were carried out for the identification of the vibrational and rotational modes characteristic of the coatings and the possible formation of hydroxyapatite. The results showed a bioactive effect in finding changes in the surface and the chemical composition of the coatings, which implies that the biomedical potential of the bioactive glass is maintained even like thin film deposited by resistive thermal evaporation.

**Resumen.** Los materiales bioactivos corresponden a un amplio espectro de materiales empleados en la industria biomédica para tratamientos odontológicos, tratamientos de traumas ortopédicos y otros desafíos de la industria medica; este proyecto busca determinar las características morfológicas, químicas y bioactivas de recubrimientos de vidrios bioactivos depositados por la técnica de evaporación térmica resistiva (ETR) depositados sobre sustratos de acero inoxidable AISI 316L; se realizó un análisis elemental de composición química a través de espectroscopia de emisión óptica por descarga luminosa (EEODL), con el fin de identificar la composición química de los recubrimientos obtenidos y los cambios por efecto de la inmersión en la solución simuladora de fluidos corporales (SFC) a diferentes tiempos de inmersión; por otra parte, se realizaron estudios morfológicos en las capas obtenidas antes y después de ser sometidos a la SFC identificando cambios en la morfología superficial como efecto del intercambio iónico entre los recubrimientos y la solución líquida; finalmente se realizaron estudios de espectroscopia raman para la identificación de los modos vibracionales y rotacionales característicos de los recubrimientos y la posible formación de hidroxiapatita. Los resultados mostraron un efecto bioactivo al encontrar cambios en la superficie y la composición

química de los recubrimientos, lo que implica que el potencial biomédico del vidrio bioactivo se mantiene aun en forma de película delgada depositada por medio de evaporación térmica resistiva.

## Corrosion of Ti6Al4V ELI surfaces texturized by CO<sub>2</sub> laser in SBF

### Corrosión de superficies de Ti6Al4V ELI texturizadas por un láser de CO<sub>2</sub> laser en SBF

A A Sandoval Amador<sup>1</sup>, J J Daza Rodriguez<sup>1</sup>, J A Sanabria Cala<sup>1</sup>, N D Montañez Supelano<sup>1</sup> and D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: anderson84f@outlook.com

**Abstract.** The aim of our study was to evaluate the corrosion behavior of Ti6Al4V ELI surfaces textured with linear geometry using a CO<sub>2</sub> laser. The linear geometry of the textures was obtained using a laserpro X380RX device with a power of 40W. The characterization of the textured surface was performed by scanning electron microscope and X-ray dispersive energy spectroscopy. The effect of the separation distance of the linear textures on the corrosion resistance of the Ti6Al4V ELI alloy was evaluated by resistance to Linear polarization, electrochemical impedance spectroscopy and potentiodynamic polarization curves in SBF. The results showed that the separation distance of the linear textures does not generate a significant effect on the corrosion resistance of the material, however all the textured surfaces presented less resistance to corrosion than the unmodified material, this decrease in the resistance to corrosion is attributed to the inclusion of elements such as molybdenum, silicon and phosphorus that are present in the lines due to the implementation of the cermark coating prior to the laser textured process.

**Resumen.** El objetivo del presente estudio fue evaluar el comportamiento frente a la corrosión de superficies de Ti6Al4V ELI texturizadas con geometría lineal mediante el uso de un láser de CO<sub>2</sub>. La geometría lineal de las texturas se obtuvo empleando un equipo laserpro X380RX con una potencia de 40W. La caracterización de la superficie texturizada se realizó mediante microscopio electrónica de barrido y espectroscopia de energía dispersiva de rayos X. El efecto de la distancia de separación de las texturas lineales en la resistencia a la corrosión de la aleación de Ti6Al4V ELI se evaluó mediante resistencia a la polarización lineal, Espectroscopia de impedancia electroquímica y curvas de polarización potenciodinámica en SBF. Los resultados mostraron que la distancia de separación de las texturas lineales no genera un efecto significativo en la resistencia a la corrosión del material, sin embargo todas las superficies texturizadas presentaron menor resistencia a la corrosión que el material sin modificar, esta disminución en la resistencia a la corrosión se atribuye a la inclusión de elementos como Molibdeno, silicio y fósforo que se presentan en las líneas debido a la implementación de el recubrimiento de cermark antes del proceso de texturizado laser.

## Effect of pulsed current electrodeposition parameters of calcium phosphates coating on Ti6Al4V ELI

## Efecto de los parámetros de electrodeposición por corriente pulsada de recubrimiento de fosfatos de calcio sobre Ti6Al4V ELI

D K Sierra Herrera<sup>1</sup>, N D Montañez Supelano<sup>1</sup>, A A Sandoval Amador<sup>1</sup> and D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: kathesihe@gmail.com

**Abstract.** The pulsed current electrodeposition is a technique of high interest, due to the advantages it has, like easily operation, control in the amount of material, high purity's deposits, coating with high homogeneity and low cost. This work study the influence of pulsed electrodeposition parameters on the coating of calcium phosphates deposited on Ti6Al4V such as composition, crystallinity and morphology. Variables like current density, pulse on and off time were used for evaluations the physicalchemistry changes of the coating during 30min. The precursors to obtain of calcium phosphates were  $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  and  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$  with a Ca/P molar ratio of 1.67. The coatings were characterized by X-ray diffraction (XRD), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) and Scanning electron microscopy (SEM). The analysis of DRX confirmed the formation of HAP. The results revealed that the variation of the current density modified the morphology of the coating. Also, the amount of material deposited increases as the off time pulse increases, allowing the diffusion of the ions in solution towards the working electrode.

**Resumen.** La electrodeposición pulsada por corriente es una técnica de amplio interés, debido a las ventajas que posee como facilidad en la operación, control en la cantidad de material, alta pureza de los depósitos, permite recubrimientos con mayor homogeneidad y bajo costo. Este trabajo estudia la influencia de los parámetros de electrodeposición pulsada sobre la composición, cristalinidad y morfología de recubrimientos de fosfatos de calcio depositados sobre muestras de Ti6Al4V. Variables como densidad de corriente, tiempo de encendido y apagado de pulsos, se usaron para evaluar los cambios físicoquímicos de los recubrimientos obtenidos durante un tiempo de 30min. Los precursores para la obtención de fosfatos de calcio fueron  $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  y  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$  con una relación molar Ca/P de 1.67. Los recubrimientos fueron caracterizados mediante difracción de rayos X (DRX), espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FTIR) y microscopia electrónica de barrido (MEB). El análisis de DRX confirmó la presencia de la fase hidroxiapatita. Los resultados muestran que la variación en la densidad de corriente modificó la morfología del recubrimiento. Además, la cantidad de material depositado aumenta a medida que aumenta el tiempo de apagado, permitiendo la difusión de los iones en solución hacia el electrodo de trabajo.

## Formation of Ca/P ceramic coatings by Plasma Electrolytic Oxidation (PEO) on Ti6Al4V ELI alloy

## Formación de recubrimientos cerámicos Ca/P mediante Oxidación Electrolítica por Plasma (PEO) sobre la aleación Ti6Al4V ELI

D I Naranjo Zuluaga<sup>1</sup>, Y J Rodriguez Jaimes<sup>1</sup>, S I Blanco Vásquez<sup>1</sup> and S J García Vergara<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: diana.naranjo@correo.uis.edu.co

**Abstract.** The formation of PEO ceramic coatings on Ti6Al4V ELI alloy was investigated using a phosphate/calcium containing electrolyte at 300 and 400V at 310K for different times. The PEO coated specimens were then heat treated at 873 and 1073K for 2 hours. Scanning electron microscopy, Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy (EDS) and X-ray diffraction analysis were used to study the composition and the morphology of the ceramic coatings. The corrosion behaviour of the coatings were studied by EIS in a simulated body fluid (SBF). The PEO-treated specimens revealed mainly a porous structure with thickness between 4 and 12 $\mu$ m according to voltage and anodizing time used. The coatings are mainly composed of hydroxyapatite, however as the voltage and anodizing time increases, the ratio of Ca/P decreases. Generally, the corrosion resistance of the alloy is improved by the PEO-treated coatings. Although, the specimens treated at 1073 K showed the presence of cracks that reduced the protection of the coatings.

**Resumen.** En el presente trabajo se estudia la formación de recubrimientos cerámicos por Oxidación Electrolítica por Plasma (PEO) sobre la aleación Ti6Al4V ELI, usando un electrolito que contiene calcio y fósforo a 300 y 400V a 310K, por diferentes tiempos. Las muestras con los recubrimientos por PEO fueron luego tratadas térmicamente a 873 y 1073K por 2 horas. Para estudiar la morfología y la composición de los recubrimientos se usaron microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopia de energía dispersa y difracción de rayos X. También se estudió la resistencia frente a la corrosión de los recubrimientos en un fluido corporal simulado (SBF) usando espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS). Los recubrimientos muestran una estructura porosa, con espesores que varían entre 4 y 12 $\mu$ m, dependiendo de las condiciones de voltaje y tiempo de anodizado usados. Los recubrimientos están compuestos principalmente por hidroxiapatita. Sin embargo, la relación Ca/P tiende a disminuir a medida que el voltaje y el tiempo de anodizado aumentan. En general, la resistencia a la corrosión de la aleación se ve favorecida por la presencia de los recubrimientos por PEO, a pesar de que en las muestras tratadas a 1073 K se observa la presencia de grietas, que disminuyen la resistencia a la corrosión de la aleación.

## HOS cell adhesion on Ti6Al4V ELI texturized by CO<sub>2</sub> laser

### Adhesión de células HOS sobre Ti6Al4V texturizado por un láser de CO<sub>2</sub>

A A Sandoval Amador<sup>1</sup>, Y M Bayona Alvarez<sup>1</sup>, H Carreño Garcia<sup>1</sup>, P Escobar Rivero<sup>1</sup> and D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: anderson84f@outlook.com

**Abstract.** In this work, the response of HOS cells on Ti6Al4V ELI textured by a CO<sub>2</sub> laser was evaluated. The test surfaces were Ti6Al4V smooth as a control and four textured surfaces with a linear geometry, these four surfaces had different separation distances in the textured lines, D1 (1000 microns), D2 (750 microns), D3 (500 microns) and D4 (250 microns). Toxicity of textured surfaces was assessed by MTT and adhesion of HOS cell lines ATCC CRL 1543 was evaluated after 5 days of culture in RPMI 1640 medium supplemented with 10% fetal bovine serum and 1% antibiotics. The results showed that the linear textures do not present toxicity after 30 days of incubation, in addition, it was found that the textured surfaces D3 and D4 improve the adhesion of the osteoblasts on the alloy of Ti6AL4V ELI, which makes viable that this type of textures is Use on orthopedic implant material.

**Resumen.** En este trabajo, la respuesta de células HOS sobre Ti6Al4V ELI texturizado por un láser de CO<sub>2</sub> fue evaluado. Las superficies de prueba fueron Ti6Al4V lisa como control y cuatro superficies texturizadas con geometría lineal, estas cuatro superficies presentaban diferentes distancias de separación en las líneas de texturizado, D1 (1000 micras), D2 (750 micras), D3 (500 micras) y D4 (250 micras). La toxicidad de las superficies texturizadas se evaluó mediante MTT y la adhesión de las células de la línea HOS ATCC CRL 1543 se evaluó después de 5 días de cultivo en medio RPMI 1640 suplementado con 10% suero fetal bovino y 1% de antibióticos. Los resultados mostraron que las texturas lineales no presentan toxicidad después de 30 días de incubación, además se encontró que las superficies texturizadas D3 y D4 mejoran la adhesión de los osteoblastos sobre la aleación de Ti6AL4V ELI, lo cual hace viable que este tipo de texturas se empleen sobre material de implante ortopédico.

## In vitro electrochemical behavior of Chitosan - PEG coatings obtained on Ti6Al4V by dip coating

## Comportamiento electroquímico in vitro de recubrimientos Quitosano PEG obtenidos sobre Ti6Al4V por dip coating

D K Sierra Herrera<sup>1</sup>, S M Guerrero Barajas<sup>1</sup>, D R Hernandez Salas<sup>1</sup>, A A Sandoval Amador<sup>1</sup> and D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: kathesihe@gmail.com

**Abstract.** In the present study, coatings of Chitosan - Polyethylene Glycol was obtained by dip coating on Ti6Al4V from polymer mixtures (30-70, 50-50, 70-30). The aim of our study was to analyze their ability to the formation of apatites and their electrochemical behaviour in the presence of a simulated physiological fluid. The coating properties were evaluated by electrochemical impedance, atomic absorption, SEM and FTIR techniques. The results showed that surfaces coated with a 50-50 ratio of chitosan PEG stimulate the formation of calcium phosphates on the surface of the material. On the other hand, it was found that the number of layers generate a very significant effect on the resistance to the degradation of the alloy in the presence of SBF, generating an increase of up to 1 and 3 orders of magnitude in the impedance of the coating of 5 and 7 layers respectively compared to the Ti6Al4V alloy.

**Resumen.** En el presente trabajo de investigación se obtuvo recubrimientos de Quitosano – Polietilenglicol por mezclas poliméricas (30-70, 50-50, 70-30) y conformadas por la técnica de dip coating sobre un sustrato de Ti6Al4V. El objetivo de nuestro estudio fue analizar la capacidad de formación de apatitas y el comportamiento electroquímico de este recubrimiento en presencia de un fluido fisiológico simulado. Para esto se evaluaron las propiedades de los recubrimientos mediante técnicas de impedancia electroquímica, absorción atómica, SEM, y FTIR. Los resultados mostraron que las superficies recubiertas con una relación 50-50 de quitosano PEG favorecen la formación de fosfatos de calcio en la superficie del material. Por otro lado, se encontró que el número de capas logra generar un efecto muy significativo en la resistencia a la degradación de la aleación en presencia de SBF, generando un incremento de hasta 1 y 3 órdenes de magnitud en la impedancia del recubrimiento de 5 y 7 capas respectivamente comparado con la aleación de Ti6Al4V.



## Study of hydroxyapatite adhesion on surgical screw to use in bone implant

## Estudio de la adhesión de hidroxapatita a tornillos quirúrgicos para uso en implante óseo

M Pereyra<sup>1</sup>, M Navatta<sup>1</sup> and E Méndez Morales<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

Email: mpereyra05@gmail.com

**Abstract.** Development of implants devices for biological organism has evolved towards the creation of adaptable and integrated materials to the organism. Ti-HA mix-materials, either as composite material or HA-coated Ti surfaces, are ideal for use as a biomaterial for bone replacement. However, continued use of these implants have shown that success is limited in the short term, with long-term problems, including low adhesion of HA to Ti, cracks in deposits, and formation of non-homogeneous deposits which produce further unequal growth of new bone tissue. The present research study a commercially developed third generation implant with a hydroxyapatite coating on titanium screw to improve the integration of the material into the bone tissue. Our results demonstrate that the low adhesion of the biomineral to the screw surface is due to a surface topography phenomenon, where the hydroxyapatite nanostructured and the metal substrate play a fundamental role for the durability of the implant in the organism.

**Resumen.** El desarrollo de dispositivos para ser usados como implante en un organismo biológico, ha evolucionado hacia la creación de materiales que se adapten y se integren al organismo. La formación de materiales mixtos Ti-HA, ya sea como material compuesto o como superficies de Ti recubiertos por HA resultan un material ideal para su empleo como biomaterial de sustitución ósea. Sin embargo, el uso continuado de este tipo de implantes ha mostrado que el éxito queda limitado al corto plazo, encontrándose problemas a largo plazo, que incluyen baja adhesión de la HA sobre el Ti, rajaduras en los depósitos, y formación de depósitos no homogéneos que producen crecimiento ulterior desparejos de nuevo tejido óseo. El presente trabajo de investigación estudia un implante desarrollado comercialmente, de tercera generación en la que una capa de hidroxapatita es depositada sobre el tornillo de titanio para mejorar la integración del material al tejido óseo. Nuestros resultados demuestran que la baja adhesión del biomineral en la superficie del material se debe a un fenómeno de la topografía de la superficie, en la que la nanoestructuración de la hidroxapatita y el metal de soporte, juegan un rol fundamental para la durabilidad del implante en el organism.

**Characterization of Materials - CM**

**Caracterización de Materiales - CM**

## Analysis of the flexural strength of boards composite with natural resin and Guadua unidirectional fibers

## Análisis de la resistencia a flexión de tableros compuestos con resina natural y fibras de Guadua unidireccionales

M Sánchez<sup>1</sup>, J Juan<sup>1</sup> and L Y Morales<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

Email: u1102014@unimilitar.edu.co

**Abstract.** During the last years the study of vegetal fibers for its use as reinforcement of composites of polymeric matrix has gained importance, mainly in the area of civil engineering. The high mechanical strength, together with its biodegradability, makes this type of fibers a competitive option, compared with the synthetic fibers usually used in the design of polymeric composites. In this work the mechanical behavior of composite boards, made with natural materials, is analyzed. For the preparation of the composite there were used fibers that were 30cm long, unidirectional, extracted from the overlay of bamboo culms of the species *Guadua Angustifolia* Kunth, aged between 4 and 6 years. The culms used to obtain the fibers were immunized with the boric acid solution. As the matrix of the composite, was used a vegetal polyurethane. The experimental characterization was based on the performance of static bending tests according to the specifications of ASTM D1037-12 “Standard Test Methods for Evaluating Properties of Wood-Base Fiber and Particle Panel Materials”, being determined the modulus of rupture and the modulus of elasticity to bending in three points. The results obtained were compared with results reported in the literature for composites made from vegetable fibers.

**Resumen.** Durante los últimos años el estudio de fibras vegetales para su uso como refuerzo de compuestos de matriz polimérica ha ganado importancia, fundamentalmente en el área de la ingeniería civil. La alta resistencia mecánica unida a su carácter biodegradable, hacen de este tipo de fibras una opción competitiva, al ser comparadas con fibras sintéticas usualmente empleadas en el diseño de compuestos poliméricos. En este trabajo se analiza el comportamiento mecánico de tableros compuestos, elaborados con materiales naturales. Para la elaboración del compuesto fueron utilizadas fibras de 30cm de longitud, unidireccionales, extraídas de la sobrepasa de culmos de bambú de la especie *Guadua Angustifolia* Kunth, con edad entre 4 y 6 años. Los culmos empleados para la obtención de las fibras fueron inmunizados con solución de ácido bórico. Como matriz del compuesto fue utilizado un poliuretano vegetal. La caracterización experimental se basó en la realización de ensayos de flexión estática de acuerdo a las especificaciones de la ASTM D1037-12 “Standard Test Methods for Evaluating Properties of Wood-Base Fiber and Particle Panel Materials”, determinándose el módulo de rotura y el módulo de elasticidad a flexión en tres puntos. Los resultados obtenidos fueron comparados con resultados reportados en la bibliografía para compuestos elaborados con fibras vegetales.

## Characterization composicional, thermal and magnetic of flying ashes of coal

## Caracterización composicional, térmica y magnética de cenizas volantes de carbón

D M Ayala Valderrama<sup>1</sup>, A J Barón González<sup>1</sup>, J A Gómez<sup>1</sup> and C A Parra Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: diana.ayala01@uptc.edu.co

**Abstract.** The search for new alternatives for the use and final disposition of industrial waste, have become increasingly relevant, due to the properties and physical and chemical characteristics that these residues possess. This article presents the structural, compositional, thermal and magnetic characterization of the industrial waste of coal, called fly ash, from the combustion process for the generation of energy, taking three fly ash samples from the industrial processes of the Department of Boyacá. This type of material has been used as lightweight aggregate in the production of cement, concrete and additives in the production of glass and glass-ceramics. As for the chemical composition, evaluated by XRF fluorescence techniques, confirmed that the three samples presented compositional values in SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxides of up to 90% of the total composition. As minor constituents, small percentages of P, Mg, S, K, Na and Ti were found. Thermal analyses using TGA-DSC techniques indicated that the materials recorded significant mass losses due to the simple decomposition of the samples and related to the loss of moisture and volatilization of the carbonaceous residues around 500°C. The stabilization of the thermal signals to temperature values above 800°C, were characterized by mass losses around 80%, resulting in a stable and homogeneous material. Finally, the results of the magnetic analyses carried out on a vibrating sample magnetometer (VSM) confirm a slightly variable ferromagnetic behaviour between 50 and 300K, which allows to establish a relevant behaviour for possible industrial, technological and construction applications.

**Resumen.** La búsqueda de nuevas alternativas para el aprovechamiento y disposición final de residuos industriales, se han hecho cada vez más relevantes, debido a las propiedades y características físicas y químicas que estos residuos poseen. En este artículo se expone la caracterización estructural, composicional, térmica y magnética de los residuos industriales de carbón, denominados cenizas volantes, provenientes del proceso de combustión para la generación de energía, tomando tres muestras de ceniza volante de los procesos industriales del Departamento de Boyacá. Este tipo de material, se ha utilizado como agregado ligero en la producción de cemento, concreto y aditivo en la producción de vidrio y vitrocerámicos. En cuanto a la composición química, evaluada a través de técnicas de fluorescencia de rayos X (XRF), confirmó que las tres muestras presentaron valores composicionales en óxidos de SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, y Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> de hasta un 90% de la composición total. Como constituyentes menores, se encontraron pequeños porcentajes de P, Mg, S, K, Na y Ti. Los análisis térmicos realizados mediante técnicas de TGA-DSC, indicaron que los materiales registran pérdidas de masa

importantes debidas a la descomposición simple de las muestras y relacionado con la pérdida de humedad y volatilización de los residuos carbonosos alrededor de los 500°C. La estabilización de las señales térmicas hacia valores de temperatura superiores a los 800°C, se caracterizaron por pérdidas de masa alrededor de un 80 %, dejando como resultado un material estable y homogéneo. Finalmente, los resultados de los análisis magnéticos realizados en un magnetómetro de muestra vibrante (VSM), confirman un comportamiento ferromagnético ligeramente variable entre 50 y 300K, lo que permite establecer un comportamiento relevante para eventuales aplicaciones industriales, tecnológicas y en construcción.

## Characterization of films formed by diffusion aluminizing applied on T91 steel

## Caracterización de películas formadas aplicando aluminización por difusión sobre un acero T91

G R Conde Rodriguez<sup>1</sup>, D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>, L S Quintero Rangel<sup>1</sup>, J A Sanabria Cala<sup>1</sup> and D Laverde Cataño<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: gerson.rafael.conde@gmail.com

**Abstract.** The aluminizing of a ferritic-martensitic steel, using a novel modification of the traditional technique of packed cement to produce a diffusion coating of aluminum at a lower cost was investigated, with a technique that permits reuse of the powdered packaging and ensure coating metal parts with complex shapes. As a source of aluminum, it is used aluminum foil commercial, whereby the part to be coated is wrapped, as the packing powder contains aluminum oxide (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) and an activating salt, ammonium chloride (NH<sub>4</sub>Cl). During the deposition process the activating salt is decomposed to react with the aluminum foil and to transfer aluminum halides to the metal substrate that will be deposit aluminum on the surface, while the Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> can be recycled for subsequent processes. The coating is effectively deposited at temperatures above 600°C and at least periods of 3h operating temperature. By applying the technique of X-ray Diffraction and Optical Metallography there were identified the principal compounds in the coating.

**Resumen.** Se realizó la aluminización de un acero ferrítico martensítico, mediante una novedosa modificación a la tradicional técnica de cementación empacada, para producir un recubrimiento por difusión de aluminio a un menor costo, con una técnica que permite la reutilización del empaque en polvo y asegurar el cubrimiento de piezas metálicas con formas complejas. Como fuente de aluminio se emplea papel aluminio comercial, mediante el cual se envuelve la pieza a recubrir, mientras que el empaque en polvo contiene óxido de aluminio (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) y una sal activadora, cloruro de amonio (NH<sub>4</sub>Cl). Durante el proceso de deposición se descompone la sal activadora para reaccionar con el papel aluminio y transferir haluros de aluminio al sustrato metálico, que depositarán aluminio en la superficie, mientras que el Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> puede reciclarse para subsiguientes procesos. El recubrimiento se deposita efectivamente a temperaturas superiores a 600°C y periodos de mínimo 3h a la temperatura de operación. Mediante la aplicación de la técnica de Difracción de rayos X (DRX) se identificaron los principales compuestos presentes en el recubrimiento.

## Characterization of puzolanic materials from residual sludge from water treatment using XRD

## Caracterización de materiales puzonálicos a partir de lodos residuales del tratamiento de agua mediante XRD

G Baron Gualdron<sup>1</sup>, A M Montaña Angarita<sup>1</sup> and C P González Cuervo<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

Email: gcbarong@gmail.com

**Abstract.** The goal of this work is to do mechanical and chemical characterization of puzonal materials using compressive strength measurements and XRD. These materials are composed of red clay and aluminous sludge produced by the treatment of potable water at plant Algodonal, Ocaña, Santander, Colombia. Ceramic pots were sintered to 1100°C and were later physically, mechanically and chemically characterized. The results showed that the relationships with which the Colombian standards according to NTC 4017 for non-structural bricks are maintained for those containing 10% (105Kgf/cm<sup>2</sup>) and 20% (102.9Kgf/cm<sup>2</sup>) of sludge with respect to clay.

**Resumen.** En este trabajo se presenta la caracterización física, mecánica y química de materiales puzolánicos. Las puzolanas fueron obtenidas por la mezcla de arcilla roja y lodos aluminosos residuales, provenientes de la planta de tratamiento de agua potable Algodonal, del municipio de Ocaña, Santander, Colombia. Se fabricaron cubos cerámicos artesanales, los cuales se sinterizaron a 1100°C y posteriormente fueron caracterizados física y químicamente. Los resultados demostraron que las relaciones con las cuales se mantienen los estándares para ladrillos no estructurales según la NTC 4017 (100Kgf/cm<sup>2</sup>) son los que contienen 10% y 20% de lodo respecto a la arcilla con resistencias de 105Kgf/cm<sup>2</sup> y 102.9Kgf/cm<sup>2</sup>, respectivamente.

## Characterization of starch/sodium montmorillonite composite (starch/Na-MMT) and its application for removal cobalt (II) and nickel (II) ions from aqueous solutions

## Caracterización de compuesto de almidón/montmorillonita sódica (almidón/Na-MMT) y su aplicación para la remoción de iones de cobalto (II) y níquel (II) en soluciones acuosas

A J Garcia Padilla<sup>1</sup>, M Acevedo<sup>1</sup>, K Moreno<sup>1</sup>, J Soares<sup>2</sup> and A Realpe<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

<sup>2</sup> University of Alberta, Edmonton, Canada

Email: agarciap@unicartagena.edu.co

**Abstract.** A composite based on starch and sodium montmorillonite (Starch/Na-MMT) were prepared by solution intercalation technique for different biopolymer to nanoclay ratios (5:1, 10:1 and 10:3, by weight) and used to adsorb Cobalt (II) and Nickel (II) from aqueous solutions. The intercalation of starch into nanoclay was observed by X-ray diffraction. Composites at 5:1 and 10:1 ratios exhibited an increase of interlayer distance in MMT. The interaction of MMT into starch matrix was confirmed by Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) due to the presence of alumina silicate bonds in starch/Na-MMT spectrum. The morphological structure was also studied by scanning electron microscopy (SEM). For adsorption study, conditions as initial concentration of metal ions and pH in the aqueous solutions were varied in order to evaluate the performance of starch, montmorillonite and composites starch/Na-MMT for removal cobalt (II) and nickel (II). The adsorption capacity of these composites was calculated and used to determine Langmuir and Freundlich isotherms. For Nickel, removal yield varied from 73.2% to 84.5% using composites previously synthesized. For Cobalt, the highest removal yield was 96% at pH 3 and initial concentration of 20ppm using MMT, while removal yield of composite for 10:1, 5:1 and 10:3 at same aqueous solutions conditions corresponded to 66, 68.5 and 73%, respectively. These results indicated the influence of nanoclay amount added during synthesis procedure on the efficiency of starch/Na-MMT for removal heavy metals.

**Resumen.** Un compuesto basado en almidón y montmorillonita sódica (almidón/ Na-MMT) fue preparado, mediante técnica de intercalación en solución para diferentes relaciones biopolímero a nanoarcilla (5:1, 10:1 y 10:3, en peso), y usado para adsorber Cobalto (II) y Nickel (II) de soluciones acuosas. La intercalación del almidón dentro de la nanoarcilla fue observada usando difracción de rayos X. Los compuestos con relación 5:1 y 10:1 exhibieron un incremento en la distancia de las intercapas en la MMT. La interacción de MMT en la matriz del almidón fue confirmada con la espectroscopia infrarroja por transformadas de Fourier (FTIR) debido a la presencia de los enlaces alúmina silicato en el espectro del almidón/Na-MMT. Adicionalmente, se estudió la estructura morfológica mediante microscopía electrónica de barrido (SEM). Para el estudio de adsorción, condiciones como concentración inicial de metales iónicos y pH de las



soluciones acuosas fueron variadas con el propósito de evaluar el desempeño del almidón, montmorillonita y compuestos almidón/Na-MMT para la remoción de cobalto (II) y níquel (II). La capacidad de adsorción de estos compuestos fue calculada y usada para determinar las isothermas de Langmuir y Freundlich. Para el níquel, los porcentajes de remoción variaron desde 73.2% hasta 84.5% usando los compuestos previamente sintetizados. Para el cobalto, el máximo porcentaje de remoción fue 96% a pH 3 y concentración inicial de 20ppm usando MMT, mientras que los porcentajes de remoción para los compuestos con relación 10:1, 5:1 y 10:3 a las mismas condiciones de la solución acuosa, correspondió a 66, 68.5 y 73%, respectivamente. Estos resultados indicaron la influencia de la cantidad de nanoarcilla adicionada durante la síntesis en la eficiencia de almidón/Na-MMT para la remoción de metales pesados.

## Compositional, thermal and microstructural characterization of the nopal (*opuntia ficus indica*)

## Caracterización composicional, térmica y microestructural del nopal (*opuntia ficus indica*)

C G Hernandez Carrillo<sup>1</sup>, C E Martínez Suarez<sup>1</sup> and J A Gómez Cuaspué<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: carlosgabriel.hernandez@uptc.edu.co

**Abstract.** The nopal (*opuntia ficus indica*) from remote times has contributed as a food product and additive in prehispanic constructions; although it grows in almost all the Colombian territory is very little use of this plant. In order to establish a certain knowledge of the chemical composition of the knot to understand the content of this in cement mixtures the mucilage's samples of fresh cactus were prepared for Thermogravimetrically Analysis (TGA) corresponding to 50% of the total weight, and one total removal of bound water from the sample at 440K corresponds to 35% of the total weight, determining the use of nopal as an additive plastic in cement mixtures. An analysis of the microstructure was also carried out by Scanning Electron Microscopy (SEM), determining a microstructure arranged to absorb and retain water, being a main characteristic of this type of plant and the ease of vegetarian in places with low rainfall. With EDX some major components such as coal and oxygen are determined with 85% of the total composition and other components such as calcium, potassium and sodium give the mucilation of nopal to be stabilizers in an alkaline medium, favorable as an anticorrosive.

**Resumen.** El nopal (*opuntia ficus indica*) desde tiempo remotos ha contribuida como producto alimenticio y aditivo en construcciones prehispánicas; aunque crece en casi todo el territorio Colombiano es muy escaso la utilización de esta planta. Con el objetivo de establecer ciertos conocimiento de las composición química del nopal para entender el aporte de este en mezclas de cemento se prepararon las muestras de mucilago de nopal fresco para analizarlas termogravimétricamente (TGA) bajo una atmósfera inerte determinando un alto porcentaje de contenido de agua libre correspondiente a un 50% del peso total, y una eliminación total de agua ligada de la muestra a 440K, correspondiente al 35% del peso total, determinando la aplicación del nopal como aditivo plastificante en mezclas de cemento. Asimismo, se realizó un análisis de la microestructura mediante microscopia electrónica de barrido (SEM), determinando una microestructura dispuesta para absorber y retener el agua, siendo esta una característica principal de este tipo de planta y la facilidad de vegetar en lugares con pocas precipitaciones. Con EDX se determinar algunos componentes mayoritarios como carbono y oxígeno con un 85% de la composición total y otros componentes como calcio, potasio, y sodio conceden al mucilago de nopal ser estabilizantes en un medio alcalino, favorable como anticorrosivo.

## Density functional study on the adsorption of carbon atoms on hexagonal-(0001) BN surface

## Estudio de la funcional densidad de la adsorción de átomos de carbono sobre la superficie (0001) hexagonal de BN

G R Casiano Jiménez<sup>1</sup>, M G Moreno-Armenta<sup>2</sup>, J A Rodríguez Martínez<sup>3</sup>, N Takeuchi Tan<sup>4</sup> and C Ortega López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

<sup>3</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>4</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Ensenada, México

Email: glacaji@hotmail.com

**Abstract.** Boron nitride is a compound that can exist in several crystalline structures as hexagonal (similar to graphite, and is the most stable structure), wurtzite (an unusual structure, but possible) and cubic, which is similar to diamonds. BN is normally used in applications of devices to high-temperature and it is a promising material to be used in nanotechnology. We want to study a new interface between BN and graphene that is a new structure, have many possible applications in nanotechnology. The study begins with the adsorption of Carbon atoms on (0001)BN hexagonal surface, group #194 or P63/mmc, which is a layered material as graphite. The main interaction is due to Van der Waals force. We use the Quantum Espresso code in order to calculate the total energy in the frame of the Density Functional Theory. All calculations were carried out using the GGA approximation, including spin polarization and the London interaction in order to include the Van der Waals forces in calculations. Initially, BN in volume was optimized and we obtained 2.510Å for lattice constants and  $c/a=2.4671$ , values are in a good agreement with experimental measurements. With these values, we made a 3x3 slab and seven layers. Symmetrically, on each surface of both faces of the slab, we put one C atom on several sites as: 1) on top of B; 2) on top of N; 3) a bridge between two adjacent atoms of B and N; 4) a bridge between two non-adjacent Boron atoms, in front of Nitrogen atoms; 5) a bridge between two non-adjacent Nitrogen atoms, in front of Boron atoms; and 6) at center of hexagon. The site with minimum energy is the bridge site between two adjacent atoms of B and N. But near there are two sites: the first is on top of N (0.014eV higher than the most stable site, and the other one, a bridge between two non-adjacent Boron atoms in front of N (0.018eV higher). A very interesting point to investigate and to discuss is that the magnetic moment is 4.00 $\mu$ Bohr for any type of adsorption. For the most stable site of adsorption C, we show the energy bands and the density of states. Calculations were performed at the DGCTIC-UNAM under projects SC16-1-IR-57. MGMA want to give thanks to the DGAPA-UNAM project IN102714-3.

**Resumen.** El nitruro de boro es un compuesto que puede existir en muchas estructuras cristalinas como la hexagonal (similar al grafito y es la estructura mas estable), wurtzita (es una estructura rara, pero posible) y la cubica, la cual es similar al diamante. El BN es normalmente

usado en aplicaciones de dispositivos de alta temperatura y es un material promisorio para ser usado en nanotecnología. Queremos estudiar una nueva interface entre el BN y el grafeno. Esta nueva estructura tiene muchas posibles aplicaciones en nanotecnología. El estudio inicia con la adsorción de átomos de carbono en la superficie hexagonal de BN (0001), grupo #194 o P63/mmc, el cual es un material como el grafito. La principal interacción es debido a la fuerza de van der Waals. Usamos el código Quantum Espresso para calcular la energía total en el marco de la Teoría Funcional de la Densidad. Todos los cálculos fueron desarrollados en la aproximación GGA, incluyendo polarización de espín y la interacción London para incluir la fuerza de van der Waals. Inicialmente, se optimizan los parámetros estructurales para el BN en volumen y se obtiene el valor para la constante de red de  $2.510\text{\AA}$  y  $c/a=2.4671$ , valores que están en buen acuerdo con medidas experimentales. Con esto valores se construye un slab de siete capas. Simétricamente, en cada superficie de ambas caras del slab, se coloca un átomo de C en varios sitios como: 1) encima del B; 2) encima del N; 3) en el puente entre dos átomos adyacentes de B y N ; 4) en el puente entre dos átomos de B no adyacentes, enfrente del átomo de N; 5) en el puente entre los átomos de Nitrogeno no adyacentes, enfrente del átomo de Boro; y 6) en el centro del hexágono. El sitio con mínima energía es el puente entre dos átomos adyacentes de B y N. Pero cerca hay dos sitios: el primero está encima del N (0.014eV por encima del sitio más estable), y otro, en el puente entre dos átomos no adyacentes de Boro enfrente del N (0.018eV por encima del sitio más estable). Un punto interesante para investigar y discutir es que el momento magnético es  $4.00\ \mu\text{Bohr}$  para cualquier sitio de adsorción. Mostramos las bandas de energía y la densidad de estados para el sitio más estable de adsorción del C. Los cálculos fueron desarrollados en la DGCTIC-UNAM bajo los proyectos SC16-1-IR-57. MGMA agradece al DGAPA-UNAM proyecto IN102714-3.

## Determination of the coefficient of dynamic friction between coatings of alumina and metallic materials

## Determinación del coeficiente de fricción dinámico entre recubrimientos de alúmina y materiales metálicos

A Santos<sup>1</sup>, Z Y Ramírez Jaimes<sup>2</sup>, Y A Ortega Vargas<sup>1</sup>, C A Sierra Berna<sup>1</sup> and E Córdoba Tuta<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Unidades Tecnológicas de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: alfonso.santos@upb.edu.co

**Abstract.** This project aims to determine the coefficient of dynamic friction between micrometric size coatings of alumina and metallic materials (Steel and aluminum); the methodology used to achieve the proposed objective consisted of 4 phases, in the first one was developed a procedure that allowed, from a pin on disk machine built based on the specifications given by the ASTM G99-05 standard (Standard test method for wear tests with a Pin on Disk machine), to determine the coefficient of dynamic friction between two materials in contact; subsequently the methodology was verified through tests between steel-steel and steel-aluminum, due to these values are widely reported in the literature; as a third step, deposits of alumina particles of micrometric size were made on a steel substrate through thermal spraying by flame; finally, the tests were carried out between pins of steel of aluminum and alumina coating to determine the coefficients of dynamic friction between these two surfaces. The results of the project allowed to verify that the developed methodology is valid to obtain coefficients of dynamic friction between surfaces in contact since the percentages of error were of 3.5% and 2.1% for steel-steel and aluminum-steel, respectively; additionally, it was found that the coefficient of friction between steel-alumina coatings is 0.36 and aluminum-alumina coating is 0.25.

**Resumen.** Este proyecto tiene como objetivo determinar el coeficiente de fricción dinámico presente entre recubrimientos de alúmina de tamaño micrométrico y materiales metálicos (acero y aluminio); la metodología utilizada para alcanzar el objetivo propuesto consistió de 4 fases, en la primera se desarrolló un procedimiento que permitiera a partir de una máquina pin sobre disco construida en base a las especificaciones dadas por la norma ASTM G99-05 (Método de prueba estándar para ensayos de desgaste con una máquina de pin y disco) determinar el coeficiente de fricción dinámico presente entre dos materiales en contacto; posteriormente se comprobó la metodología a través de la realización de pruebas entre acero-acero y acero-aluminio, debido a que estos valores son ampliamente reportados en la literatura; como tercera fase se realizaron los depósitos de partículas de alúmina de tamaño micrométrico sobre un sustrato de acero a través de rociado térmico por llama; por último se realizaron los ensayos entre pines de acero o aluminio y recubrimiento de alúmina para determinar los coeficientes de fricción dinámicos presentes entre estas dos superficies. Los resultados del proyecto permitieron comprobar que la

metodología desarrollada es válida para obtener coeficientes de fricción dinámica entre superficies en contacto ya que los porcentajes de error fueron de 3.5% y 2.1% para acero-acero y acero-aluminio, respectivamente; adicionalmente se encontró que el coeficiente de fricción entre acero - recubrimiento de alúmina es de 0.36 y aluminio - recubrimiento de alúmina es de 0.25.

## Effect of grain size in the reduction of lateritic Ni ore in Linder reactor

## Efecto del tamaño de grano en la reducción de mineral laterítico de Ni en reactor Linder

N Rojas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: nicolas.rojas@uptc.edu.co

**Abstract.** In the department of Cordoba, Colombia, is recognized the existence of lateritic minerals of great acidity rich in iron and Nickel. Nickel percentage in this mineral is of order of 0.5 to 2%, for exploitation is request previous processes as crushing and homogeneous of the samples before entering calcination stage where it is expected a great reduction for could to enter the electric arc furnace EAF. The final product is Nickel iron in order 28 to 35 per cent of nickel. In each of the above steps, very fine particles are generated that present problems, costs and losses so it is necessary implementation of agglomeration methods in order to recover the lost material for degrading of the material. Based in this problem, is to analyse the importance that can present this particles during the calcination an pre-reduction processes for now its chemical behaviour at laboratory level, establish their efficiency as raw material for obtain Nickel iron. The study understand the reduction of samples in Linder reactor, submit the material to 950°C. While is used of a neutral atmosphere from nitrogen (N<sub>2</sub>) and coal as redactor agent in a 10 per cent of the total material (900g) that enters the reactor whit a inferior size (hald the diameter) about of mineral. 90 per cent was the fine grain mineral, between 1.18 and 2mm of diameter (mesh +16; -10) according to ASTM E11/95. Is observed that grain size don't have relevant effect during reduction test and neither were found iron or nickel losses due rotation effect, reducing or entraining gasses flux into reactor. It seeks to encourage research to smaller sizes and different scales of application (pilot tests) in order to arrive at a more precise, useful industrial level.

**Resumen.** En el departamento de Cordoba Colombia, se reconoce la existencia de minerales tipo laterita de gran acides, ricas en hierro y níquel. El porcentaje de níquel en este material es del orden de 0.5 a 2%, para la explotación se requieren procesos previos como trituración y homogenización antes de ingresar a la etapa de calcinación donde se espera la mayor reducción para poder ingresar al horno de arco eléctrico HAE. El producto final es ferróníquel con tenores de 28 a 35% de níquel. En cada una de las anteriores etapas, se generan partículas bastante finas que generan problemas, costos y pérdidas por lo que se hace necesario la implementación de métodos de aglomeración con fin de recuperar el material perdido por la degradación del material. Con base en esta problemática, se busca analizar la importancia que pueden presentar este tipo de partículas durante los procesos de calcinación y pre-reducción para conocer su comportamiento químico y a nivel de laboratorio, establecer su eficiencia como materia prima para la obtención de ferróníquel. El estudio comprende la reducción de las muestras en un

reactor tipo Linder, sometiendo el material a 950°C. De igual manera se hizo uso de una atmosfera neutra a partir de nitrógeno (N<sub>2</sub>) y carbón como agente reductor el cual contemplará un 10% del material total que ingresó al reactor (900g) que cumplió con un tamaño menor (la mitad del diámetro) al del mineral. El 90% fue el mineral de grano fino, de granulometría entre 1.18 y 2.00mm de diámetro (tamiz +16; -10) según norma ASTM E11/95. Se demuestra que el tamaño de grano no tiene efecto relevante durante la prueba de reducción ni fueron encontradas pérdidas de hierro o nickel por; efecto de rotación, flujos de gases reductores o de arrastre dentro del reactor. Se busca incentivar la investigación a tamaños menores y a diferentes escalas de aplicación (pruebas piloto) con fin de poder llegar a una conclusión más precisa, útil a nivel industrial.



## Effect of temperature on the structure and chemical composition of zeolites sintered from fly ash from coal combustion

## Efecto de la temperatura en la estructura y composición química de zeolitas sinterizadas a partir de cenizas volantes de la combustión del carbón

G Peña Rodríguez<sup>1</sup>, E Y Beltran Mendez<sup>1</sup> and J A Calderón Arenas<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México

Email: gabrielpr@ufps.edu.co

**Abstract.** We report the effect of temperature in a range of 150°C, 200°C, 250°C and 300°C on the structure and chemical composition of zeolites sintered from fly ash generate by coal fired Termotasajero SA Power Station. The synthesis was performed using 50g of fly ash fineness (ASTM E-11/95 No. 200<75µm) and 60g of sodium hydroxide pellets Merck No. 011-002-00-6, Which were ground by agate mortar and subjected to temperatures of 150°C, 200°C, 250°C and 300°C using a Ney Vulcan D-130 electric muffle with a 5°C/min ramp for 12 hours, once the sample is at room temperature, is mixed with 550 ml of distilled water and allowed to stand for 24 hours, then the supernatant water is removed and the washing is started using BOECO grade 3hw filter paper, and distilled water for 24 hours, the sample is drying at 110°C in an oven BINDER for 24 hours, finally deposited in a glass bell with silica gel. The crystal structure of the samples was studied using Bruker D8 Advance X-Ray Diffraction (XRD). For the microanalysis and morphology, the FEI Quanta FG 650 Scanning Electron Microscope (SEM) was used. The specific surface, pore size, and pore volume were carried out using nitrogen fisorción by the 3-Flextm Micromeritics system, and the equations of Brunauer-Emmett-Teller (BET). The results show that the specific surface of the samples increases with increasing temperature and that the highest percentage of crystalline phase was obtained for the sample subjected to 300°C, reporting a Faujasite type crystal structure. The microanalysis reports as main elements the Fe, Si Al, and in a lower concentration Na and Mg.

**Resumen.** Se reporta el efecto de la temperatura en un rango 150°C, 200°C, 250°C y 300°C, sobre la estructura y composición química de zeolitas sinterizadas a partir de cenizas volantes de la combustión de carbón de la termoeléctrica de Termotasajero SA. La síntesis se realizó, usando 50gr de cenizas volantes con tamaño de partícula pasante tamiz ASTM E-11/95 No. 200 (75µm), y 60gr de pellets de hidróxido de sodio Merck No. 011-002-00-6, los cuales se trituraron mediante mortero de ágata, y se sometieron a la temperaturas de 150°C, 200°C, 250°C y 300°C usando mufla eléctrica Ney Vulcan D-130, con una rampa de 5°C/min por 12 horas, una vez la muestra se encuentra a temperatura ambiente, se mezcla con 550ml de agua destilada y se deja reposar por 24 horas, luego se retira el agua sobrenadante y se inicial el lavado usando papel filtro BOECO grado 3hw, y agua destilada por 24 horas; posteriormente la muestra se lleva a estufa de secado BINDER a 110°C por 24 horas, finalmente se depositan en una campana con

silica gel, para iniciar la caracterización. La estructura cristalina de las muestras se estudió usando difracción de rayos X (DRX), mediante el equipo Bruker D8 Advance. Para el microanálisis y morfología se utilizó el microscopio electrónico de barrido (MEB) FEI Quanta FG 650. La superficie específica, el tamaño y volumen de poro se llevó a cabo usando fisisorción de nitrógeno mediante el equipo 3 Flextm Micromeritics, y las ecuaciones de Brunauer–Emmett–Teller (BET). Los resultados muestran que la superficie específica de las muestras aumenta al incrementarse la temperatura, y que el mayor porcentaje de fase cristalina se obtuvo para la muestra sometida a 300°C, reportándose una estructura cristalina tipo Faujasita. El microanálisis reporta como elementos mayoritarios el Fe, Si Al, y en menor concentración Na y Mg.

## Effects of CaO on the compaction and sintering by plasma of powder metallurgical iron

## Efecto del CaO en la compactación y sinterización por plasma de Fe pulvimetalurgico

A Sarmiento Santos<sup>1</sup> and H G Ariza Suárez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: geovannysy@hotmail.com

**Abstract.** This work centers on evaluating the effects of the addition of calcium oxide (CaO) in the compaction and sintering of powder metallurgical iron Ancoor Steel 1000®. Samples of Iron were made with proportions of 0.5%, 1%, 1.5% and 2% by weight of CaO, which were compacted under pressure of 700Mpa without lubricant, showing the lubricating effect of CaO. The samples were sintered in a luminescent discharge furnace, in an atmosphere of H<sub>2</sub>+Ar at a temperature of 1150°C. A XRD analysis was used to determine the formation of compounds, this analysis evidenced the formation of hematite and magnetite, which were found both on the surface and in the volume. The polarization resistance characterization was performed using the EIS polarization electrochemical method on the samples, in a solution of 1000ppm of chloride. As result of this characterization, researchers found that for concentrations of 0.5% and 1% CaO, the polarization resistance R<sub>p</sub> increases, from 3.5Kohm to 11.7Mohm, 2.2Mohm, respectively.

**Resumen.** En este trabajo se estudia el efecto de la adición de óxido de calcio (CaO) en la compactación y sinterización del Fe pulvimetalurgico Ancoor Steel 1000®, para lo cual se elaboraron probetas de Fe con proporciones de: 0,5%, 1%, 1,5% y 2% de CaO en peso, las cuales fueron compactadas a presión de 700Mpa sin ningún tipo de lubricante, revelando el efecto lubricante del CaO. Las probetas se sinterizaron en un horno de descarga luminiscente, con una atmosfera de H<sub>2</sub>+Ar a una temperatura de 1150°C. Para determinar la formación de compuestos se utilizó un análisis de DRX, evidenciando la formación de: hematita y magnetita; las cuales se encontraron tanto en la superficie como en el volumen. Igualmente, se realizó una caracterización de la resistencia a la polarización, empleando el método electroquímico de polarización EIS sobre las muestras, en una solución de 1000ppm de cloruro; como resultado de este procedimiento se encontró que a una concentración de 0,5% y 1% CaO, se aumenta la resistencia a la polarización R<sub>p</sub> con valores de 11,7Mohm, 2,2Mohm respectivamente.

## Electrical behavior of $\text{LaFe}_{0.2}\text{Co}_{0.8-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ( $x=0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ ) perovskite type oxide as anode in solid oxide fuel cells

## Comportamiento eléctrico del óxido tipo perovskita $\text{LaFe}_{0.2}\text{Co}_{0.8-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ( $x=0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ ) para ánodo en pilas de combustible de óxido sólido

W Rativa Parada<sup>1</sup>, J A Gómez<sup>1</sup>, J B Carda<sup>2</sup> and E Vera López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Universitat Jaume I, Castelló de la Plana, España

Email: wilson.rativa@uptc.edu.co

**Abstract.** Solid Oxide Fuel Cells (SOFC) are devices that convert the chemical energy of a fuel directly to electrical energy. Because of their high efficiency and low emission of pollutants, nowadays these systems have become an important alternative to fossil fuel technology. SOFC have three principal components: anode, cathode and electrolyte. On the anode is produced the fuel oxidation. Anode must be good catalyst for electrochemical oxidation, excellent both electric and ionic conductor, having a close porosity at 40%, and chemically stable. The perovskite type oxides are some of the materials that have demonstrated relevant properties and outstanding performance as anode in SOFC. In this investigation, five compositions of the  $\text{LaFe}_{0.2}\text{Co}_{0.8-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$  ( $x=0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ ) oxide were synthesized using polymerization-combustion with citric acid method, from the corresponding nitrates of  $\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  99.9%,  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  99.9%,  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  99.9% y  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  99.9%, in concentration 1.00M. The cation solutions were dosified in glasses with magnetic stirring (100rpm) and reflux. Then, citric acid (2.00M) was added in a molar ratio of 0.5:1 (citric acid:nitrate) and each solution was initially subjected to plate heating at 100°C for 2 hours until complete drying was achieved. Subsequently, each material obtained from the preliminary stage was subjected to a plate heating process at 400°C for 30 minutes to allow a self-combustion process. The resulting materials were brought to a furnace for 12 hours at 850°C to remove carbon residues and consolidate the oxides. The characterization through X ray diffraction (XRD) allowed to establish that all the signals corresponded to the respective perovskite type structure with no secondary phases. It was also found that the modifications made with cobalt ( $x \leq 0.4$ ) generated a transformation of the crystalline lattice, from an orthorhombic to a rhombohedral configuration, mainly due to the change introduced in the bond distances of the cations of the positions B of the structure (B-O), which had significant effect on the properties of the system. Analyses performed with the experimental diffraction data through the Debye-Scherrer equation, allowed an average crystal size of 30nm to be calculated. Electron microscopy (SEM-TEM) analysis showed that the materials have a homogeneous morphology with interconnected porosity, as well as grain sizes smaller than 1 $\mu\text{m}$ . The electrical characterization was performed by Impedance spectroscopy (IS) between 40Hz and 13MHz, using pellets that were obtained from the pressing of 0.05g of each sample at a uniaxial pressure of 5.0MPa for 120 seconds. Each pellet was sintered at 900°C for 12 hours and then each face was coated with platinum paste. The Nyquist type plots and the  $Z''$  versus Log frequency plots revealed the presence of two resistances: bulk grain resistance

and boundary grain resistance, in addition to the absence of a Warburg type resistance, which is related to effects of ionic conductivity. Also, the conductivity plots from room temperature to 600°C showed that the oxides have a semiconductor type of electrical behavior, improving their conductivity levels with the increase in doping with cobalt and with the increase in the temperature of measurement due to thermal excitation process. Finally, the activation energy values of the systems were obtained by analyzing the slope of the Logarithm of the conductivity versus the inverse of the temperature ( $1000/T-1$ ) plots, showing a linear behavior that complies with the Arrhenius relationship. All the samples presented small values of activation energy, which added to the Nyquist type plots, confirms that electronic conduction mechanisms are the ones that prevail within the microstructure of solids.

**Resumen.** Las pilas de combustible de óxido sólido (SOFC) son dispositivos que convierten la energía química de un combustible directamente en energía eléctrica. Debido a su alta eficiencia y baja emisión de contaminantes, hoy en día estos sistemas se han convertido en una alternativa importante a la tecnología de combustibles fósiles. Tienen tres componentes principales: ánodo, cátodo y electrolito. En el ánodo se produce la oxidación del combustible. El ánodo debe ser un buen catalizador para la oxidación electroquímica, excelente conductor iónico y electrónico, con una porosidad cercana al 40%, y químicamente estable. Los óxidos tipo perovskita son algunos de los materiales que han demostrado propiedades relevantes y un rendimiento sobresaliente como ánodo en SOFC. En esta investigación, se sintetizaron cinco composiciones del óxido  $\text{LaFe}_{0,2}\text{Co}_{0,8}\text{-XCrXO}_3$  ( $x=0,0, 0,2, 0,4, 0,6, 0,8$ ), usando el método de polimerización-combustión con ácido cítrico a partir de los correspondientes nitratos de  $\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  99.9%,  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  99.9%,  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  99.9%, y  $\text{Co}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$  99.9% en concentración 1.00M. Las disoluciones de los cationes fueron dosificadas en recipientes de vidrio con agitación magnética (100rpm) y reflujo. En seguida, se adicionó ácido cítrico (2.00M) en relación molar 0.5:1 (ácido cítrico:nitratos) y cada solución se sometió a un calentamiento en plancha a 100°C durante 2 horas hasta conseguir un secado completo. Posteriormente, cada material obtenido de la etapa preliminar se sometió a un proceso de calentamiento en plancha a 400°C por 30 minutos para permitir un proceso de autocombustión. Los materiales resultantes se llevaron a un horno por un tiempo de 12 horas a una temperatura de 850°C para eliminar los residuos de carbono y consolidar los óxidos finales. La caracterización estructural, realizada mediante difracción de rayos X (XRD), permitió establecer que todas las señales correspondían con una estructura tipo perovskita con ausencia de fases secundarias. Se encontró también, que las modificaciones realizadas con cobalto ( $x \leq 0,4$ ), generaron la transformación de la red cristalina, de una configuración ortorrómbica a una romboédrica, principalmente debidos al cambio introducido en las distancias de enlace de los cationes de las posiciones B de la estructura (B-O), lo que tuvo un efecto significativo sobre las propiedades del sistema. Los análisis realizados con los datos de difracción experimentales a través de la ecuación de Debye-Scherrer, permitieron calcular un tamaño de cristal promedio de 30nm. Los análisis de microscopía electrónica (SEM-TEM), permitieron determinar que los materiales poseen una morfología homogénea con una porosidad interconectada, así como tamaños de grano menores a 1 $\mu\text{m}$ . La caracterización eléctrica se realizó mediante espectroscopia de impedancias (IS) entre 40Hz y 13MHz, usando pastillas que fueron obtenidos a partir del prensado de 0.05g de cada muestra a una presión uniaxial de 5.0MPa durante 120 segundos. Cada pastilla fue sinterizada a 900°C por 12 horas y luego cada cara se recubrió con pasta de platino. Las gráficas tipo Nyquist y las gráficas  $Z''$  en función de la frecuencia, revelaron la presencia de dos resistencias, una en el interior y otra en el borde del cristal, además de la ausencia de una resistencia tipo Warburg, que está relacionada con efectos de conductividad iónica. Asimismo, las gráficas de conductividad, desde temperatura ambiente hasta 600°C, mostraron que los óxidos tienen un comportamiento eléctrico tipo semiconductor,

mejorando sus niveles de conductividad con el aumento en el dopaje con cobalto y con el incremento en la temperatura de medida debido a un proceso de activación térmica. Finalmente, los valores de energía de activación de los sistemas fueron obtenidos mediante el análisis de la pendiente de las gráficas del logaritmo de la conductividad en función del inverso de la temperatura ( $1000 T^{-1}$ ), mostrando un comportamiento lineal que cumple con la relación de Arrhenius. Todas las muestras presentaron pequeños valores de energía de activación, lo que sumado a las gráficas tipo Nyquist, confirma que son mecanismos de conducción electrónicos los que imperan dentro de la microestructura de los sólidos.

## Evaluation of removal of heavy metals water pollutants using polyacrylamide/sodium montmorillonite composite (PAM/Na-MMT)

## Evaluación de la remoción de metales pesados usando compuesto de poliacrilamida/montmorillonita sódica (PAM/Na-MMT)

K Moreno<sup>1</sup>, M Acevedo<sup>1</sup>, A J Garcia Padilla<sup>1</sup>, J Soares<sup>2</sup> and Realpe Alvaro<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

<sup>2</sup> University of Alberta, Edmonton, Canada

Email: kmorenos@unicartagena.edu.co

**Abstract.** In the present work, a composite of polyacrylamide as polymer matrix and nanoclay was synthesized via free-radical crosslinking polymerization with three different clay to monomer ratios (1:1, 2:1 and 4:1, by weight). Fourier transform infrared spectroscopy, X-ray diffraction and scanning electron microscopy were used to characterise the polyacrylamide/sodium montmorillonite composite (PAM/Na-MMT). The FTIR analysis showed the presence of peaks characteristic of clay, which confirmed the interaction between montmorillonite and polymer. XRD and SEM analysis indicated the no complete exfoliation of nanoclay layers. The adsorption capacity of PAM/Na-MMT has been evaluated in Cobalt (II) and Nickel (II) aqueous solutions at different pH and initial concentration of these metal ions and Langmuir and Freundlich isotherms were also determined. For Nickel adsorption study, the highest removal percentage corresponded to 99.3% obtained for 2:1 weight ratio composite, pH 6 and initial concentration of 100ppm. For Cobalt, highest removal of 98.7% was achieved for 4:1 weight ratio composite, pH 6 and initial concentration of 60ppm. It is evident from the results that this composite exhibits good performance for removal heavy metals especially at conditions of low acidity.

**Resumen.** En el presente trabajo, un compuesto de poliacrilamida como matriz polimérica y nanoarcilla fue sintetizado vía polimerización por radicales libres con tres relaciones diferentes de arcilla a monómero (1:1, 2:1 y 4:1, en peso). Espectroscopia infrarroja por transformadas de Fourier, difracción de rayos X y microscopía electrónica de barrido fueron las técnicas usados para caracterizar el compuesto poliacrilamida/ montmorillonita sódica (PAM/Na-MMT). El análisis FTIR mostró la presencia de picos característicos de la arcilla, lo cual confirmó la interacción entre la montmorillonita y el polímero. Los análisis XRD y SEM indicaron la no completa exfoliación de las láminas de nanoarcilla. La capacidad de adsorción de PAM/Na-MMT fue evaluada en soluciones acuosas de Cobalto (II) y Níquel (II) a diferentes pH y concentraciones iniciales de estos iones metálicos, y las isothermas de Langmuir y Freundlich también fueron determinadas. Para el estudio de adsorción de Níquel, el mayor porcentaje de remoción correspondió a 99.3% obtenido para el compuesto con relación 2:1 en peso, pH 6 y concentración inicial de 100ppm. Para el Cobalto, la máxima remoción de 98.7% fue alcanzada para compuesto con relación 4:1, pH 6 y concentración inicial de 60ppm. Es evidente conforme

los resultados que este compuesto exhibe buen desempeño para la remoción de metales pesados, especialmente en condiciones de baja acidez.



## Formation and decomposition of siderite for carbon dioxide treatment

## Formación y descomposición de siderita para tratamiento de dióxido de carbono

E Y Mora Mendoza<sup>1</sup>, E Vera López<sup>1</sup>, S Saxena<sup>2</sup>, V Drozd<sup>2</sup>, A Durygin<sup>2</sup> and A Sarmiento Santos<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Florida International University, Miami, United States of America

Email: [eduin.mora@uptc.edu.co](mailto:eduin.mora@uptc.edu.co)

**Abstract.** Carbon dioxide CO<sub>2</sub> is a pollutant gas and the main cause of global warming with contributions close to 65%. In this research work, we studied some conditions for formation and decomposition of siderite from iron ore or iron oxides along with CO<sub>2</sub> at suitable thermodynamic conditions. Siderite stability depends of temperature and CO<sub>2</sub> pressure, which was confirmed with simulations performed in FACTSAGE software. Temperatures between room temperature and 200°C and pressures between 10 and 50bar were adjusted for analyze the carbonation behavior. Influence of water and time reaction in carbonation reaction were studied, showing that siderite formation increased with bigger amounts of water and longer reaction times. The decomposition reaction was studied in air and argon showing that siderite can be decomposed forming magnetite, and graphite. Using vacuum system, the siderite was decomposed at 300°C. Techniques as X-ray diffraction, scanning electron microscope SEM, Raman spectroscopy and surface area analysis were employed to study the material.

**Resumen.** El dióxido de carbono CO<sub>2</sub> es un gas contaminante y la principal causa del calentamiento global con contribuciones cercanas al 65%. En este trabajo de investigación, estudiamos algunas condiciones para la formación y descomposición de siderita desde mineral de hierro u óxidos de hierro junto con CO<sub>2</sub> en condiciones termodinámicas adecuadas. La estabilidad de la siderita depende de la temperatura y la presión de CO<sub>2</sub>, lo que se confirmó con simulaciones realizadas en el software FACTSAGE. Se ajustaron las temperaturas entre la temperatura ambiente y 200°C y presiones entre 10 y 50bar para analizar el comportamiento de la carbonatación. Se estudió la influencia del agua y del tiempo de reacción, en la reacción de carbonatación, mostrando que la formación de siderita aumentó con mayores cantidades de agua y tiempos de reacción más largos. La reacción de descomposición se estudió en aire y argón mostrando que la siderita se puede descomponer formando magnetita y grafito. Utilizando el sistema de vacío, la siderita se descompone a 300°C. Se utilizaron técnicas como difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido SEM, espectroscopia Raman y análisis de área superficial, para estudiar el material.

## Global characterization of a liquid crystal display LCX038ARA in pure-phase using the retarder-rotor model

## Caracterización global de la modulación en fase pura de una matriz de cristal líquido LCX038ARA mediante el modelo retardador-rotor

J J Salamanca Vela<sup>1</sup>, Y Torres Moreno<sup>1</sup> and C Acevedo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: johanasalamanca29@gmail.com

**Abstract.** A liquid crystal display is an optoelectronic device contains molecules in an intermediate state between solid and liquid. Due to unique properties, these devices have been used in applications such as spatial light modulators. Most Spatial light modulators are a nematic type, i.e the molecules are a helical arrangement. Each nematic spatial light modulator has slight differences in phase modulation respect to incident radiation. In this work are showed theoretical and experimental results of the pure-phase modulation of a Sony LCX038ARA LCD liquid crystal display for a linear polarized light beam with wavelength 633.8nm using the retarder-rotor model.

**Resumen.** Una matriz de cristal líquido es un dispositivo optoelectrónico que contiene moléculas que se encuentran en el estado intermedio entre sólido y líquido. Debido a las propiedades únicas de estos dispositivos han sido ampliamente utilizados en aplicaciones tales como los moduladores espaciales de luz. La mayoría de moduladores espaciales de luz son de tipo nemático, es decir las moléculas se encuentran formando una estructura helicoidal. No obstante, cada modulador espacial de luz nemático presenta diferencias en la modulación de fase respecto de la radiación óptica visible incidente. En el presente trabajo se muestran resultados teóricos y experimentales de la modulación en fase pura de una matriz de cristal líquido modelo LCD Sony LCX038ARA para una onda luminosa con polarización lineal y longitud de onda 633.8nm utilizando el modelo retardador-rotor.

## **Implementation and characterization of influent variables in dewaxing and sinterized in the investment casting process**

## **Implementación y caracterización de variables en etapas de descenderado y sinterizado proceso microfundición**

**D L Blanco Estupiñan<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: david.blanco@escuelaing.edu.co

**Abstract.** This work has as main objective to present the results of the research process developed in the Military Industry factory Santa Bárbara. It was focused on the improvement of the process of micro-fusing, because there was a defect associated with the handling of materials, procedures and control plans, which were not completely standardized and directly affected compliance with the requirements of the micro-fused parts. The variables in the dewaxing and sinterized stage were evaluated in order to analyse the defect presented in pieces obtained by the investment casting process. In addition, the stable phases of the silica in the heating process were characterized by scanning electron microscopy and x-ray diffraction. The achieved results can contribute to improve and make effective microfining process in the industry.

**Resumen.** El presente trabajo de investigación tiene como objetivo principal dar a conocer los resultados del proceso de investigación desarrollado en la Industria Militar fábrica Santa Bárbara enfocado en el mejoramiento del proceso de microfundición, dado que dentro de este se presentaba una defectología asociada con el manejo de materiales, procedimientos y planes de control, que no se encontraban normalizados en su totalidad y que afectaban directamente el cumplimiento de los requisitos de las piezas microfundidas. Las variables en la etapa de descenderado y sinterizado fueron evaluadas con el fin de analizar la defectología presente en piezas obtenidas por el proceso de microfundición; además, se caracterizaron las fases estables de la sílice en el procedimiento de calentamiento por medio de microscopia electrónica de barrido y difracción de rayos x. Los resultados alcanzados pueden contribuir a la mejora y eficacia del proceso de microfundición en la industria.

## Influence of Nitrogen on the optical properties of ZrO<sub>x</sub>N<sub>y</sub> thin films

## Influencia del nitrógeno en las propiedades ópticas de películas delgadas de ZrO<sub>x</sub>N<sub>y</sub>

J E Alfonso<sup>1</sup>, C C Pinzón Cárdenas<sup>1</sup> and G I Cubillos González<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: jealfonsoo@unal.edu.co

**Abstract.** Zirconium oxynitride (ZrNO) thin films were deposited on common glass substrates via RF magnetron Sputtering technique in reactive phase. The parameter of deposition of the ZrNO films was the flow rates  $N_2/[N_2+Ar]$ . The films were characterized morphologically, structurally and optically, by Scanning Electron Microscopy (SEM), X-Ray Diffraction (XRD) and UV-vis-NIR spectroscopy, respectively. The SEM images allow the identification of an inverse relationship between surface porosity of the films and the nitrogen content in the flux ratio. XRD patterns show that the films have an amorphous phase when the nitrogen concentration is low, and involve structurally to a cubic phase when nitrogen concentration increases. The study of the transmittance spectra allowed to calculate the absorption coefficient ( $\alpha$ ), extinction coefficient ( $\kappa$ ), index of refraction ( $\eta$ ), dielectric function ( $\epsilon$ ) the gap of energy (Egd) of ZrNO films.

**Resumen.** Películas delgadas de oxinitruro de zirconio (ZrNO) se depositaron sobre sustratos de vidrio común a través de la técnica de Sputtering RF magnetrón en fase reactiva. El parámetro de deposición de las películas de ZrNO fue el caudal  $N_2/[N_2+Ar]$ . Las películas se caracterizaron morfológicamente, estructural y ópticamente, mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), difracción de rayos X (DRX) y espectroscopia UV-vis-NIR, respectivamente. Las imágenes SEM permiten la identificación de una relación inversa entre la porosidad superficial de las películas y el contenido de nitrógeno en la relación de flujo. Los patrones DRX muestran que las películas tienen una fase amorfa cuando la concentración de nitrógeno es baja y evolucionan estructuralmente a una fase cúbica cuando aumenta la concentración de nitrógeno. El estudio de los espectros de transmitancia permitió calcular el coeficiente de absorción ( $\alpha$ ), el coeficiente de extinción ( $\kappa$ ), el índice de refracción ( $\eta$ ), la función dieléctrica ( $\epsilon$ ) la brecha de energía (Egd) de las películas de ZrNO.

## Influence of the ionic radius on structural and magnetic response of the system $\text{Pr}_{0.48}\text{TR}_{0.02}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$

## Influencia del radio iónico en la respuesta estructural y magnética del sistema $\text{Pr}_{0.48}\text{TR}_{0.02}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$

I M Saavedra Gaona<sup>1</sup>, I Supelano<sup>1</sup>, A J Barón González<sup>1</sup> and C A Parra Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: indry.saavedra@uptc.edu.co

**Abstract.** The transition metal-insulator (MIT), of the oxides type perovskita formed by elements of Rare Earths (TR), presents an interesting behavior in the family derived from  $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$ . In this paper, it is studied the influence of radio-ionic of the TR in the crystalline structure and in the synthesis of the new family type  $\text{Pr}_{0.48}\text{TR}_{0.02}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$  (TR=Eu, Sm, Dy), produced by the technique of the solid state reaction. The structural characterization of the system was realized by x-rays diffraction (DRX) and analysis of refinement Rietveld, demonstrating that the samples crystallize in a orthorhombic structure with spatial group Pnma # 62, without significant changes in phase structural generated by the variation of the radio-ionic. They were measurements of magnetization as a function of temperature with the vibrating sample magnetometer VSM of the Quantum Design, in temperature range from 50 to 310K. The curves of the magnetization as a function of temperature presented a similar behavior for all system. The results obtained are consistent with that reported by other authors for similar systems that present the transition MIT.

**Resumen.** La transición metal-aislante (MIT), de los óxidos tipo perovskita formados por elementos de Tierras Raras (TR), presenta un comportamiento interesante en la familia derivada del  $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$ . En este trabajo se estudia la influencia del radio iónico de la TR en la estructura cristalina y en la síntesis de la nueva familia tipo  $\text{Pr}_{0.48}\text{TR}_{0.02}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$  (TR=Eu, Sm, Dy), producida por la técnica de reacción en estado sólido. Se realizó la caracterización estructural del sistema a través de la técnica de difracción de rayos X (DRX) y análisis de refinamiento Rietveld, demostrando que las muestras cristalizan en una estructura ortorrómbica del grupo espacial Pnma # 62, sin cambios significativos de fase estructural generados por la variación del radio iónico. Se realizaron medidas de magnetización en función de la temperatura con el magnetómetro de muestra vibrante VSM de la Quantum Design, en un rango de temperatura de 50 a 310K. Las curvas de magnetización en función de la temperatura presentan un comportamiento similar para todo el sistema. Los resultados obtenidos concuerdan con lo reportado por otros autores para sistemas similares que presentan la transición MIT.

## Mechanical and physical characterization of guadua angustifolia kunth fibers from Colombia

## Caracterización física y mecánica de fibras de guadua angustifolia kunth provenientes de Colombia

A Nemocon<sup>1</sup>, A Benavides<sup>1</sup>, J Calderon<sup>1</sup>, N Rodriguez<sup>1</sup>, C Sjogreen<sup>1</sup>, G Espitia<sup>1</sup>, R Peraza<sup>1</sup> and M Espitia<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Uniminuto, Bogotá, Colombia

Email: anemocon@uniminuto.edu.co

**Abstract.** Natural fibers have been implemented as reinforcing material in different areas such as concrete, polymer and composite materials; therefore, the importance of knowing their properties. In this work, results of the physical-chemical and mechanical characterization of natural guadua fibers are shown; to achieve these findings, Scanning Electron Microscopy (SEM), Atomic Force Microscopy (AFM), moisture absorption, apparent density, and fiber stress tests were used. These setups were done to analyze the general behavior of guadua fibers and to determine their viability as a reinforcement in building materials. From the characterization, it was determined that the guadua fibers has an excellent tensile strength, which can be used as a reinforcement in polymer matrices because of its roughness. That is, it has adhesion, is light and presents an excellent absorption compared to other fibers.

**Resumen.** Las fibras de origen natural se han implementado como material de refuerzo en distintas áreas, por ello, la importancia de conocer sus propiedades. En este trabajo se muestran los resultados de la caracterización físico-química y mecánica de fibras naturales de guadua (angustifolia Kunth); para lograrlo, se emplearon técnicas de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM), Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) y ensayos de absorción de humedad, densidad aparente y tensión en las fibras. Esto con el fin de analizar el comportamiento en general de las fibras de guadua, para determinar la viabilidad como refuerzo en materiales de construcción. A partir de la caracterización se determinó que la guadua tiene una excelente resistencia a tensión, que puede ser utilizada como refuerzo en matrices poliméricas debido a su rugosidad, es decir, tiene adherencia, es liviana y presenta una excelente absorción en comparación con otras fibras.

## Mechanical and physical characterization of panels elaborated with Arundo Dónax fibers and vegetal resin

## Caracterización física y mecánica de paneles elaborados con fibras de Arundo Dónax y resina vegetal

D E Baquero Basto<sup>1</sup>, L Y Morales<sup>1</sup> and M Sánchez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

Email: u1101844@unimilitar.edu.co

**Abstract.** Composite panels using natural fibers and vegetal resin were manufactured and their properties were studied. The fibers used were extracted from the cane of the species Arundo Dónax which immunized according to the recommendations of the Colombian Technical Standard. As the matrix of the composite, a vegetal resin was employed. The properties of the composite panels: density, absorption capacity, percentage of swelling, tensile, compression, and flexural strength, were determined according to the specifications of the American Society for Testing and Materials. For the elaboration of the panels, a method of manual molding and a process of compaction by pressing were used. To guarantee the adhesion to the matrix, a chemical treatment was made to the fibers. The results show the feasibility of the use of materials of vegetal origin in the elaboration of biocomposites for non-structural purposes.

**Resumen.** Paneles compuestos fueron elaborados utilizando fibras de origen natural y resina vegetal y sus propiedades fueron estudiadas. Las fibras utilizadas fueron extraídas de la caña de la especie Arundo Dónax, la cual fue inmunizada de acuerdo a las recomendaciones de las Normas Técnicas Colombianas. Como matriz del compuesto, una resina vegetal fue empleada. Las propiedades de los paneles: densidad, capacidad de absorción, porcentaje de hinchamiento, resistencia a tensión, compresión y flexión fueron determinadas de acuerdo a las especificaciones de la Sociedad Americana para Ensayos y Materiales. Para la elaboración de los paneles, un método de moldeo manual y un proceso de compactación por prensado fueron utilizados. Para garantizar la adherencia de las fibras a la matriz, un tratamiento químico fue aplicado a las fibras. Los resultados obtenidos muestran la factibilidad del empleo de materiales de origen vegetal en la elaboración de biocompuestos de usos no estructurales.

# Mechanical and physical characterization of pita fibers from Colombia

## Caracterización física y mecánica de fibras de cabuya provenientes de Colombia

A Benavides<sup>1</sup>, A Nemocon<sup>1</sup>, J Calderon<sup>1</sup>, N Rodriguez<sup>1</sup>, C Sjogreen<sup>1</sup>, G Espitia<sup>1</sup>, R Peraza<sup>1</sup> and M Espitia<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Uniminuto, Bogotá, Colombia

Email: abenavidesv@uniminuto.edu.co

**Abstract.** Natural fibers have been implemented as reinforcing material in different areas such as concrete, polymer and composite materials; therefore, the importance of knowing their properties. In this work, results of the physical-chemical and mechanical characterization of natural pita fibers are shown; to achieve these findings, scanning electron microscopy (SEM), atomic force microscopy (AFM), moisture absorption, apparent density, and fiber stress tests were used. These setups were done to analyze the general behavior of pita fibers and to determine their viability as a reinforcement in building materials. From the characterization, it was determined that the pita fibers has an excellent tensile strength, which can be used as a reinforcement in polymer matrices because of its roughness. That is, it has adhesion, is light and presents an excellent absorption compared to other fibers.

**Resumen.** Las fibras de origen natural se han implementado como material de refuerzo en distintas áreas, por ello, la importancia de conocer sus propiedades. En este trabajo se muestran los resultados de la caracterización físico-química y mecánica de fibras naturales de cabuya; para lograrlo, se emplearon técnicas de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM), Microscopía de fuerza atómica (AFM) y ensayos de absorción de humedad, densidad aparente y tensión en las fibras. Esto con el fin de analizar el comportamiento en general de las fibras de cabuya, para determinar la viabilidad como refuerzo en materiales de construcción. A partir de la caracterización se determinó que la cabuya tiene una excelente resistencia a tensión, que puede ser utilizada como refuerzo en matrices poliméricas debido a su rugosidad, es decir, tiene adherencia, es liviana y presenta una excelente absorción en comparación con otras fibras.



# Mn-modification effects on Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> structural, optical and vibrational properties

## Efectos de la modificación con Mn en las propiedades estructurales, ópticas y vibracionales del Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>

A M Raba Páez<sup>1</sup>, E A Murillo Ruiz<sup>1</sup> and M Rincon Joya<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: angelamercedesrp@ufps.edu.co

**Abstract.** In this study Mn-modification (at 1%, 2.5%, 5% and 10%) on Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> was realized through the Pechini method; the annealing temperatures: 400°C, 500°C, 600°C and 700°C, were employed to study the thermal stability of the system and the crystalline growth. The crystallization at high temperatures has been investigated, because low annealing temperature cannot improve the crystallization, and the effect of Mn-modification concentration is worthy of further investigation. Before annealing the samples were analyzed by TGA. The structural analysis through XRD is realized for to study a possible increase of the crystallite size (L) by increasing the Mn concentration; for the samples at 700°C and 1% and 2.5% concentrations, L is increased of 39.81 at 46.45nm, while L was almost constant for 5% and 10%. After Mn-modification the evolution of (100) and (180) peaks of Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> was observed suggesting that they were well defined only until 2.5%. The morphology was examined through SEM. IR and Raman spectroscopies allowed to analyze vibrational modes present in the samples: the IR spectrums for the samples at 400°C, 500°C and 600°C exhibited a band around to 1100cm<sup>-1</sup> which can be asociated to C-C(vC-C) and C-O(vC-O) vibrations; at 700°C were distinguished the absorption bands around to 875cm<sup>-1</sup> and 500cm<sup>-1</sup> that are characteristics of the Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> orthorhombic structure. Vibration modes associated with Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> were found with the Raman spectroscopy; these become less intense after Mn-modification. The band gap energy was obtained through UV-Vis spectrophotometry which revealed a shift towards higher values for the 1%, 2.5% and 5% concentrations at 500°C.

**Resumen.** En este estudio la modificación de Mn (al 1%, 2,5%, 5% y 10%) en Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> se realizó a través del método de Pechini. Las temperaturas de sinterización: 400°C, 500°C, 600°C y 700°C, se emplearon para estudiar la estabilidad térmica del sistema y el crecimiento cristalino. Se ha investigado la cristalización a altas temperaturas, ya que baja temperatura de sinterización no puede mejorar la cristalización, y el efecto de la concentración de modificación de Mn merece una investigación adicional. Antes de la sinterización, las muestras se analizaron mediante TGA. El análisis estructural a través de DRX se realizó para estudiar un posible incremento del tamaño cristalito (L) incrementando la concentración de Mn; para las muestras a 700°C y concentraciones del 1% y 2,5%, L se incrementó de 39,81 a 46,45nm, en tanto que para 5% y 10% L fue casi constante. Después de la modificación con Mn se observó la evolución de los picos (100) y (180) del Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> sugiriendo que ellos estaban bien definidos solo hasta el

2,5%. La morfología se examinó mediante SEM. Las espectroscopías IR y Raman permitieron analizar modos vibracionales presentes en las muestras: los espectros IR para las muestras a 400°C, 500°C y 600°C exhibieron una banda alrededor de 1100cm<sup>-1</sup> los cuales pueden ser asociados a vibraciones C-C(vC-C) y C-O(vC-O); a 700°C se distinguieron bandas de absorción alrededor de 875cm<sup>-1</sup> y 500cm<sup>-1</sup> que son características de la estructura ortorrómbica del Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Modos vibracionales asociados con el Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> fueron hallados con la espectroscopía Raman; estos se vuelven menos intensos después de la modificación con Mn. La energía de banda gap fue obtenida a través de espectrometría UV-Vis la cual reveló un cambio hacia valores más altos para concentraciones del 1%, 2,5% y 5% a 500°C.

## Morphology, crystallographic structure, corrosion resistance and biocompatibility of zirconium oxynitride films

### Cambios en la morfología, estructura, resistencia a la corrosión y biocompatibilidad de películas delgadas de oxinitruro de zirconio en función del método de depósito

G I Cubillos González<sup>1</sup>, Y A Umaña Pérez<sup>1</sup> and J E Alfonso<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: gcubillos@unal.edu.co

**Abstract.** In this work zirconium oxynitride (ZrNO) films were deposited on stainless steel substrate via physics techniques (RF and Dc sputtering) and chemical technique (spray pyrolysis). The results evidence the effect on morphology, crystallographic structure, resistance to corrosion and biocompatibility of the technique used. In the case of the crystallographic structure, the films grown by physical methods are monoclinic and cubic while that the films grown via spray pyrolysis has cubic crystallographic phase. The corrosion resistance evaluated from the linear polarization curves for the steels coated with ZrNO films shows that that resistance is two orders of magnitude higher than to bare steel. The in vitro biocompatibility study evaluated from the cell viability (MTT) analysis with C57BL/6 mouse osteoblasts shows a cell growth on ZrNO films deposited via physics methods is far higher to that of the same cells growth on the bare steel.

**Resumen.** Se depositaron películas delgadas de oxinitruro de zirconio sobre acero inoxidable, mediante tres técnicas distintas: sputtering con radio frecuencia, sputtering DC y spray pirólisis. Los resultados muestran que de acuerdo a la técnica de depósito la morfología, estructura, resistencia a la corrosión y biocompatibilidad del cerámico depositado cambia. En cuanto a la morfología se observa un decrecimiento en el tamaño de partícula y rugosidad en el siguiente orden: sputtering RF.

## On the high-temperature phase transitions of the superprotonic conductor $\text{Cs}_5\text{H}_3(\text{SO}_4)_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ : they really exist?

## Respecto a las transiciones de fase de alta temperatura en el conductor superprotónico $\text{Cs}_5\text{H}_3(\text{SO}_4)_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ : ¿realmente existen?

**J Romero<sup>1</sup>, V Mendoza<sup>2</sup> and E Ortiz<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de la Costa, Barranquilla, Colombia

Email: jonathanromero@mail.uniatlantico.edu.co

**Abstract.** Since more than twenty years ago, all the research works affirms that when  $\text{Cs}_5\text{H}_3(\text{SO}_4)_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  is heated through 414K, the observed jump in a high ionic conductivity values corresponds to a physical transformation: the first-order superprotonic conducting phase transition. A careful high-temperature research, on this acid salt, was performed by means of simultaneous Thermogravimetric and Differential Scanning Calorimetry (DSC-TG), modulated (MDSC) and conventional Differential Scanning Calorimetry (DSC) and Impedance Spectroscopy (IS). The results present evidences that this transformation is, instead of physical, of chemical nature. The sudden ionic conductivity increase is an exclusive consequence of a partial thermal decomposition, where liquid water as a decomposition product plays a key role. Additionally, it was found that the 360K intermediate temperature transformation (so called isostructural phase transition) is also of chemical nature.

**Resumen.** Durante más de dos décadas, todos los trabajos de investigación coinciden al afirmar que cuando  $\text{Cs}_5\text{H}_3(\text{SO}_4)_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  se calienta a través de 414K, el salto que se observa en la conductividad iónica corresponde a una transformación física: la transición de fase de conducción superprotónica, la cual se ha clasificado de primer orden. En este trabajo se desarrolló un cuidadoso estudio del comportamiento de esta sal acida a temperaturas superiores al ambiente, usando las técnicas calorimetría diferencial de barrido simultánea con análisis termogravimétrico (DSC-TG), calorimetría diferencial de barrido convencional (DSC) y modulada (MDSC) y espectroscopia de impedancia (IS). Los resultados presentan solidas evidencias que la naturaleza de esta transformación es química y no física como se reporta en la literatura. El súbito aumento de la conductividad iónica es consecuencia exclusiva de un proceso de descomposición térmica parcial, en el cual el agua líquida como producto de descomposición desempeña un papel protagónico. Además, se encontró que la transformación de temperatura intermedia (llamada transición de fase isoestructural) a alrededor de 360K, también es de naturaleza química.

## Optimization of chalcopyrite flotation process by changing of particle size and dismantling stage

## Optimización de proceso de flotación de calcopirita mediante variación de tamaño de partícula y etapa de deslamado

N Rojas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: nicolas.rojas@uptc.edu.co

**Abstract.** Is analysed the particle size variation and the presence of clays and sludges on copper ore (chalcopyrite) during foam flotation process. In this case, was required a ball mill for reduction of particles to near sizes, varying them between mesh 80 and mesh 230 and the handling of a JIG machine for gravimetric concentration and sludge removal of the samples. Concentration process by foam flotation is performed through Denver flotation cell DFC with capacity of approximately 200g. There is greater value mineral losses within the residues during the fine sample of buoyancy process, greater than 160 mesh. Is observed a reduction in time about of 30 per cent and decrease in the manipulation of reagents when the material is manipulated to intermediate grain size (between meshes No. 100 and 120) and after the sludge removal is done, avoiding the handling of peptizers during foam flotation process, generating thus, an optimization of 40 per cent of the process traditionally worked. Similarly, it's noted an improvement of lamp removal within JIG machine that, by conventional methods, it is possible to avoid excessive addiction of reagent agents for disposal and control of undesirable material (slodes and clads) into the pulp. Although, is obtained a better removal process of undesirable material in the Copper ore of fine particle, that is presented during the transportation and the interest mineral losses into the process of elimination of clays in the sample due to forming a polar layer on the surface of the pulp.

**Resumen.** Es analizada la variación del tamaño de la partícula y la presencia de arcillas y lodos dentro de un mineral de cobre (calcopirita) durante el proceso de flotación por espuma. Para esto, fue requerido el manejo de un molino de bolas para la reducción de las partículas a tamaños cercanos, variándose entre mallas 80 y malla 230 y el manejo de un equipo tipo JIG para concentración gravimétrica y remoción de lodos de las muestras. El proceso de concentración por flotación es realizado mediante celda de flotación tipo Denver con capacidad de 200g aproximadamente. Se presenta mayor pérdida de mineral de valor dentro de los residuos durante el proceso de flotación de muestras finas, superior a 160 mallas. Se observa una reducción de tiempo de cerca del 30% y disminución en el manejo de reactivos al manejar el material a tamaños de grano intermedios (entre 100 y 120 mallas) y luego de realizarse el proceso de remoción de lamas, evitando el uso de peptizadores durante el proceso de flotación, generando así, una optimización de cerca del 40% del proceso tradicionalmente trabajado. Se observa una mejora en el proceso de remoción de lamas dentro del equipo tipo JIG que, por métodos convencionales, es posible evitar la adición excesiva de agentes reactivos para el desalajo y

control de material indeseable (lodos y arcillas) dentro de la pulpa aunque se obtiene un mejor proceso de remoción de material indeseable en muestras de particulado fino, se presenta el transporte y la pérdida de mineral de interés durante la eliminación de arcillas de la muestra debido a la formación de capas polares en la superficie de la pulpa.

# Physico-mechanical characterization of cocos nucifera fibers from Colombia

## Caracterización física y mecánica de fibras de coco nucífera provenientes de Colombia

M Espitia<sup>1</sup>, A Benavides<sup>1</sup>, A Nemocon<sup>1</sup>, J Calderon<sup>1</sup>, N Rodriguez<sup>1</sup>, Y Bustos<sup>1</sup>, C Sjogreen<sup>1</sup>, G Espitia<sup>1</sup> and R Peraza<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Uniminuto, Bogotá, Colombia

Email: mespitian@yahoo.com

**Abstract.** Natural fibers have been implemented as reinforcing material in different areas such as concrete, polymer and composite materials; therefore, the importance of knowing their properties. In this work, results of the physical-chemical and mechanical characterization of natural coconut fibers Cocos nucifera are shown; to achieve these findings, Scanning Electron Microscopy (SEM), Atomic Force Microscopy (AFM), moisture absorption, apparent density, and fiber stress tests were used. These setups were done to analyze the general behavior of coconut fibers and to determine their viability as a reinforcement in building materials. From the characterization, it was determined that the coconut fibers has an excellent tensile strength, which can be used as a reinforcement in polymer matrices because of its roughness. That is, it has adhesion, is light and presents an excellent absorption compared to other fibers.

**Resumen.** Las fibras de origen natural se han implementado como material de refuerzo en distintas áreas, por ello, la importancia de conocer sus propiedades. En este trabajo se muestran los resultados de la caracterización físico-química y mecánica de fibras naturales de coco (cocos nucifera); para lograrlo, se emplearon técnicas de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM), Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) y ensayos de absorción de humedad, densidad aparente y tensión en las fibras. Esto con el fin de analizar el comportamiento en general de las fibras de coco nucífera, para determinar la viabilidad como refuerzo en materiales de construcción. A partir de la caracterización se determinó que el coco tiene una excelente resistencia a tensión, que puede ser utilizada como refuerzo en matrices poliméricas debido a su rugosidad, es decir, tiene adherencia, es liviana y presenta una excelente absorción en comparación con otras fibras.

## Production, structural characterization and magnetic of system Pr<sub>0.5-x</sub>Dy<sub>x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub> (x=0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08)

## Producción, caracterización estructural y magnética del sistema Pr<sub>0.5-x</sub>Dy<sub>x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub> (x=0,0.02, 0.04, 0.06, 0.08)

M A Martínez Tunarosa<sup>1</sup>, I Supelano<sup>1</sup>, A J Barón González<sup>1</sup> and C A Parra Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tuja, Colombia

Email: monica.martineztunarosa@uptc.edu.co

**Abstract.** Pr<sub>0.5-x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub> It is known that cobaltite shows proprieties like metal-insulating transition MIT; based on this composite Pr<sub>0.5-x</sub>Dy<sub>x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub> (x=0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08) was produced by solid state reaction standard method. In this research, an XDR was performed at room temperature, the analysis based on Rietveld's refinement shows that samples crystallize in an orthorhombic structure with Pnma space group (#62). Magnetization-temperature curves between 50 to 300K are similarly in all the samples particularly, Pr<sub>0.5-x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub> sample presents the structural and magnetic characteristics reported by some authors who have MIT evidenced, these results suggested that synthesized Pr<sub>0.5-x</sub>Dy<sub>x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub> show a transition MIT.

**Resumen.** Es conocida que la cobaltita Pr<sub>0.5-x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub> muestra propiedades de transición metal-aislante, MIT. Basados en este compuesto se produjo el sistema Pr<sub>0.5-x</sub>Dy<sub>x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub> (x=0, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08), por el método estándar de reacción en estado sólido. En este trabajo se realizaron medidas de difracción de rayos X a temperatura ambiente, los análisis de refinamiento Rietveld evidencian que todas las muestras cristalizan en una estructura ortorrómbica de grupo espacial Pnma (#62). Las curvas de magnetización en función de la temperatura en el rango entre 50 y 300K son similares en todas las muestras. En particular la muestra Pr<sub>0.5-x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>, presenta las características estructurales y magnéticas reportadas por algunos autores que han evidenciando MIT, de esta forma los resultados sugieren que todo el sistema Pr<sub>0.5-x</sub>Dy<sub>x</sub>Ca<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>, sintetizado potencialmente presenta una transición MIT.



## Relation between environmental factors and deterioration of the defensive walls of Cartagena de Indias

## Relación entre factores ambientales y el deterioro de la muralla de Cartagena de Indias

M Saba<sup>1</sup>, H F Martínez Batista<sup>1</sup> and E Quiñones<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

Email: manuelsaba1987@gmail.com

**Abstract.** To evaluate the impact of the environmental factors on the deterioration of the defensive walls of Cartagena de Indias have been conducted a deep analysis and classification of the present level of decay of the stone, physical-chemical characterization of the rock and analyzed the possible exogenous factors that directly or indirectly cause such deterioration. Environmental factors were characterized to finally assess their relationship with respect to the types of deterioration identified; pollution of rainfall, groundwater and vehicular traffic have been measured, as well as deposited salts and moisture distribution on the structure, among others. As a main conclusion, it was obtained that the environmental surrounding the historic center of Cartagena de Indias, deteriorates gradually the stone materials of the wall and that it is therefore advisable to implement measures to mitigate these phenomena in order to preserve the historical heritage of the City.

**Resumen.** Para evaluar el impacto de los factores ambientales en el deterioro de los muros defensivos de Cartagena de Indias se ha realizado un profundo análisis y clasificación del nivel actual de descomposición de la piedra, caracterización físico-química de la roca, y se analizaron los posibles factores exógenos que directa o indirectamente causan tal deterioro. Los factores ambientales se caracterizaron para evaluar finalmente su relación con respecto a los tipos de deterioro identificados; la contaminación de las lluvias, del agua subterránea y de las emisiones debidas al tráfico vehicular, así como las sales depositadas y la distribución de la humedad en la estructura, entre otras. Como conclusión principal se obtuvo que el entorno ambiental del centro histórico de Cartagena de Indias, deteriora gradualmente los materiales pétreos del muro, y por lo tanto es aconsejable implementar medidas para mitigar estos fenómenos con el fin de conservar el patrimonio histórico de la Ciudad.

# Rheological behaviour of magnetorheological fluids subjected to constant field

## Comportamiento reológico de fluidos magnetorreológicos sometidos a campo constante

H A Fonseca Montaña<sup>1</sup>, J A Tabares Giraldo<sup>2</sup> and J Restrepo Cardenas<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Universidad del Valle, Cali, Colombia

<sup>3</sup> Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

Email: hugoalexander.fonseca@uptc.edu.co

**Abstract.** Magnetorheological fluid of magnetite micrometer powders were characterized by Mössbauer spectroscopy to analyse their stoichiometry, coated with oleic acid and dispersed in oil. These magnetorheological fluids were subjected to magnetic induction to analyse the rheological properties as viscosity and laminar stress in the regime of the flow rate. The obtained results are compared with those of other authors. To these fluids additionally, surface tension with magnetic field and effects of the magnetic induction measuring the field within of liquid, are analysed.

**Resumen.** Fluidos magnetorreológicos conformados con polvos de magnetita micrométrica que se caracterizaron por espectroscopia de Mössbauer para analizar su estequiometria, son recubiertos con ácido oleico y dispersos en aceite. Estos fluidos magnetorreológicos se sometieron a inducción magnética para analizar las propiedades reológicas como viscosidad y esfuerzo laminar en el régimen de bajas velocidades. Los resultados obtenidos son comparados con los de otros autores. Adicionalmente se analiza la tensión superficial con campo magnético y los efectos de la inducción magnética sobre el fluido magnetorreológico, midiendo el campo en el seno del mismo.

# Spectra Raman of low temperatures and high pressures of calcium oxide

## Espectros Raman del óxido de calcio a bajas temperaturas y altas presiones

**M Rincon Joya<sup>1</sup>, A Raba<sup>2</sup> and J J Barba Ortega<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>3</sup> Foundation of Researches in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: mrinconj@unal.edu.co

**Abstract.** In this work, the behavior of the vibrational modes of the calcium oxide samples prepared by different methods was studied. For temperatures ranging from 8k to room temperature, a cryostat was used. The Raman spectra show very subtle changes with the decrease in temperature, being more noticeable for the samples with PH regulation. For spectra at high hydrostatic pressures, the changes are significant. Raman spectra for low temperatures and high pressures allow us to make a comparative study of the samples.

**Resumen.** En este trabajo se estudió el comportamiento de los modos vibratorios de muestras de óxido de calcio preparadas por diferentes métodos. Para las bajas temperaturas desde 8k hasta temperatura ambiente, se utilizó un criostato. Los espectros Raman muestran cambios muy sutiles con la disminución de temperatura, siendo más notable para las muestras con regulación de PH. Para los espectros en altas presiones hidrostáticas, los cambios son significativos. Los espectros Raman para bajas temperaturas y altas presiones nos permiten realizar un estudio comparativo de las muestras en estudio.

## **Stabilization of the geomechanical behavior in Tunja city area's expansive clays of the northeast with calcareous materials extracted from the Cundi-Boyacense high plateau**

## **Estabilización del comportamiento geo-mecánico de las arcillas expansivas del sector noreste de la ciudad de Tunja con materiales calcáreos extraídos del altiplano Cundi-boyacense**

**E F Castillo Jimenez<sup>1</sup>, O J Gutiérrez-Junco<sup>1</sup> and C M Moreno Téllez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: esteban.cj4@hotmail.com

**Abstract.** Tunja city is located in the Andean region of the center of Colombia, above the Andes' oriental mountainous system. The city because of its geological and structural conditions, it has suffered historically from affectations in the civil works, due to differential movements, associated principally to the high expansiveness from clays related to marine environments' deposits. In order to generate a contribution to the geo-mechanical behavior of the Tunja's city expansive clays, an experimental program was developed in the present study, to characterize the physical-chemical, microstructural, and mechanical properties by means of X-ray diffraction (XRD), X-ray fluorescence, optical microscopy and scanning electron, in addition to determining the specific area by physical adsorption of nitrogen. On the other hand, the mechanical characterization was carried out with conventional laboratory load tests, in order to evaluate the influence of these properties on the geo-mechanical behavior observed, from measurements of volumetric change and expansive potential in natural unaltered samples. For this purpose were sampled and analyzed in the laboratory the physical and chemical properties of limestone, which is exploited in different parts of the department of Boyacá (7 department's mines) with the purpose of assessing their potential content of calcium carbonate ( $\text{CaCO}_3$ ), and from the same ones, to elaborate hydrated lime ( $\text{Ca}[\text{OH}]_2$ ), with which will be made additions to different percentages in altered samples, simulating densities approximated to the ones in the situ material, in order to evaluate the physical properties -chemical and mechanical properties of the clay-lime mixture, verifying if the stabilization of the expansive clay with lime is significant to generate better conditions in the construction of civil works in Tunja city.

**Resumen.** La ciudad de Tunja se ubica en la región andina del centro de Colombia, sobre el sistema montañoso oriental de la cordillera de los Andes. Por sus condiciones geológicas y estructurales, la ciudad ha sufrido históricamente de afectaciones en las obras civiles debido a movimientos diferenciales, asociados principalmente a la alta expansividad de arcillas relacionadas a ambientes marinos de deposición. Para generar un aporte al comportamiento geo-mecánico de las arcillas expansivas de la ciudad de Tunja, se ha desarrollado en el presente estudio, un programa experimental, realizado para caracterizar las propiedades físico-químicas, microestructurales, y mecánicas por medio de técnicas de Difracción de Rayos X (DRX),

Fluorescencia de Rayos X, microscopía óptica y electrónica de barrido, además de determinar el área específica por adsorción física de nitrógeno. Por otra parte, la caracterización mecánica se realizó con ensayos convencionales de carga en laboratorio, con el fin de evaluar la influencia de estas propiedades, en el comportamiento geo-mecánico observado, a partir de mediciones de cambio volumétrico y potencial expansivo en muestras naturales inalteradas. Para este propósito se muestrearon y analizaron en laboratorio las propiedades físicas y químicas de la roca caliza, que es explotada en distintos lugares del departamento de Boyacá (7 minas del departamento), con el fin de evaluar su potencial contenido de carbonato de calcio ( $\text{CaCO}_3$ ), y a partir de las mismas elaborar cal hidratada ( $\text{Ca}[\text{OH}]_2$ ), con la cual se harán adiciones en distintos porcentajes a muestras alteradas simulando densidades aproximadas a las que tiene el material in situ, con el fin de evaluar las propiedades fisico-químicas y mecánicas de la mezcla de material arcilloso con la cal, verificando si la estabilización de la arcilla expansiva con cal es significativa para generar mejores condiciones en la edificación de obras civiles en la ciudad de Tunja.

# Structural and electrical characterization of the Ce<sub>0.8</sub>Pr<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub> system

## Caracterización estructural y eléctrica del sistema Ce<sub>0.8</sub>Pr<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub>

A F Cruz Pacheco<sup>1</sup>, J A Gómez<sup>1</sup> and C A Parra Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: andresfelipe.cruz@uptc.edu.co

**Abstract.** This work describes the structural and electrical characterization of the Ce<sub>0.8</sub>Pr<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub> system synthesized by the combustion method using citric acid as a chelating agent. The crystallographic nature of the calcined solids is analysed by X-ray diffraction (XRD) and corroborated with Rietveld refinement, resulting in a cubic crystalline system with cell parameters  $a=b=c=5.4684\text{\AA}$  and symmetry Fm $\bar{3}m$  (225). The size of the crystalline domains was averaged 14nm calculated with the Debye-Scherrer equation. The images obtained by scanning electron microscopy (SEM) allowed to establish that the solid presents homogeneous morphology and microstructure. The electrical characterization by means of impedance spectroscopy (IE) allows to establish that praseodymium modified cerium oxide has the characteristics of a mixed conductor.

**Resumen.** Este trabajo describe la caracterización estructural y eléctrica del sistema Ce<sub>0.8</sub>Pr<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub> sintetizado por el método de combustión utilizando ácido cítrico como agente quelante. La naturaleza cristalográfica del sólido calcinado es analizado mediante difracción de rayos X (DRX) y corroborado con refinamiento Rietveld, dando como resultado un sistema cristalino cubico con parámetros de red de  $a=b=c=5.4684\text{\AA}$  y simetría Fm $\bar{3}m$  (225). El tamaño de los dominios cristalinos fue calculado con la ecuación de Debye-Scherrer y fue en promedio de 14nm. Las imágenes obtenidas por microscopia electrónica de barrido (MEB) permitieron establecer que el sólido presenta morfología y microestructura homogénea. La caracterización eléctrica mediante espectroscopia de impedancia (EI) permite establecer que el óxido de cerio modificado con praseodimio presenta características propias de un conductor mixto.

## Structural and morphological evaluation of the $\text{CaTi}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$ system (M=Dy, Ho, Gd, Ni) (x=0.5)

## Evaluación estructural y morfológica del sistema $\text{CaTi}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$ (M=Dy, Ho, Gd, Ni) (x=0.5)

K Martínez Gonzalez<sup>1</sup>, A F Cruz Pacheco<sup>1</sup>, J A Gómez<sup>1</sup> and C A Parra Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: karennayib.martinez@uptc.edu.co

**Abstract.** Current work studies and evaluates the structural and morphological of  $\text{CaTi}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$  system where M=Dy, Ho, Gd and Ni, in a degree of substitution of X=0.5, in order to improve the magnetic response of synthesized materials by the solid state reaction method. For each system stoichiometric quantities of  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Ho}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Dy}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Gd}_2\text{O}_3$ ,  $\text{NiO}$  and  $\text{CaCO}_3$  precursors were used, which were treated at  $700^\circ\text{C}$  for 2 hours and grounded to ensure the homogeneity of compositions. The structural characterization was initiated by the modeling provided by the SPuDS software, which allowed to evaluate the critical tolerance values of structures under temperature conditions. The X-ray diffraction analysis and Rietveld refinement using the GSAS and EXPGUI software, revealed that all samples show an orthorhombic configuration with spatial group Pnma (62). The morphological characterization performed by scanning electron microscopy (SEM), confirmed the obtention of regular and homogeneous solids with sizes around  $300\text{-}400\mu\text{m}$  in clusters form. These results demonstrate that is necessary to complement this information in order to provide more effective tools in the synthesis of these materials in order to determine the effect of mass transport properties, that could be provoking by thermal effects and affect the solubility of the M cation in in order to elucidate the real structure of these phases by ordering defects (in particular oxygen vacancies), which would lead to the formation of complex extended defects.

**Resumen.** El presente trabajo estudia y evalúa, estructural y morfológicamente el sistema  $\text{CaTi}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$  donde M=Dy, Ho, Gd y Ni, en un grado de sustitución de X=0.5, con el fin de mejorar la respuesta magnética de los materiales sintetizados a través del método de reacción de estado sólido. Para cada síntesis se utilizaron los correspondientes óxidos precursores de  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Ho}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Dy}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Gd}_2\text{O}_3$ ,  $\text{NiO}$  y  $\text{CaCO}_3$ , los cuales fueron tratados térmicamente a  $700^\circ\text{C}$  por 2 horas para eliminar trazas de humedad y molturados para asegurar la homogeneidad y la estequiometría de las composiciones. La caracterización estructural se inició mediante el modelamiento aportado por el programa SPuDS, lo cual permitió determinar los valores críticos de tolerancia de las estructuras bajo condiciones de temperatura. Posteriormente el análisis de rayos X (XRD), realizado entre  $20^\circ$  y  $90^\circ$  con un subsecuente refinamiento Rietveld usando el programa GSAS y EXPGUI, demostraron que todas las muestras cristalizaron en una estructura ortorrómbica con grupo espacial Pnma (62). La caracterización morfológica realizada mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), confirmó la obtención de sólidos de estructura regular y homogénea con tamaños de clusters alrededor de los  $300\text{-}400\mu\text{m}$ . Estos resultados,

demuestran que es necesario complementar esta información con el fin de aportar mas herramientas en la obtención de estos materiales con el fin de determinar el efecto de las propiedades de transporte de masa que podrían estar suscitándose por efecto térmico y afectar la solubilidad del cation M en la estructura con el fin de elucidar la estructura real de estas fases por ordenamiento de defectos (en particular vacancias de oxígeno), lo que conduciría a la formación de complejos defectos extendidos.



# Study of optical and structural properties of perovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> thin films prepared by sequential evaporation

## Estudio de las propiedades ópticas y estructurales de películas delgadas de la perovskita CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> preparadas por evaporación secuencial

M A Reinoso<sup>1</sup> and G Gordillo Guzmán<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: miareinososa@unal.edu.co

**Abstract.** The technology of hybrid solar cells based on organometallic compounds with perovskite structure has achieved significant advances, reaching in a very little time efficiencies exceeding 20%, that makes this technology a potential candidate to do transit to a production at the industrial level. Nevertheless, to be able to achieve its scaling, it is necessary to understand completely it is functioning, which demands to investigate aspects related to the mechanisms that affect their optical, electrical and structural properties. The search for alternatives to improve the stability of both the precursor materials as the device is also an aspect of great importance. The good performance of hybrid cells fabricated using perovskite compounds as an active layer are achieved as a result of its outstanding optical and electrical properties. In particular, the perovskites are characterized by having a high absorption coefficient and efficient transport both holes and electrons. In this work, we describe the conditions to grow thin films of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> (MAPI) with perovskite structure, by sequential evaporation of their precursors: lead iodide (PbI<sub>2</sub>) and Methylammonium Iodide (MAI). The evaporation process was automatically controlled by a Virtual Instrumentation system (VI), which allows controlling the temperature of the sources of evaporation using PID and PWM control algorithms developed with the software LabView. Modules Field Point 1000, TC120 and an USB6341 card of the National Instrument were used as hardware. Also, the system has facilities for data processing and real time monitoring of the process state. X-Ray Diffraction (XRD) measurements carried out on the prepared samples, the obtained diffractograms show reflections in  $2\theta=14.22^\circ$ ,  $28.66^\circ$  and  $32.14^\circ$  which are characteristic of the MAPI compound with tetragonal structure. The influence of deposition parameters on the optical properties was also studied through measurements of spectral transmittance and reflectance; from these measures was determined the optical gap of thin films of MAPI, which proved to be 1.6eV, which is consistent with the value reported in the literature. It was found that the method of evaporation sequential implemented allows preparing, with a high degree of reproducibility, thin films of MAPI with characteristics suitable to be used as the active layer of solar cells.

**Resumen.** La tecnología de celdas solares híbridas basadas en compuestos metal-orgánicos con estructura perovskita, ha logrado importantes avances, alcanzando en muy poco tiempo eficiencias superiores al 20%, lo que convierte a esta tecnología en potencial candidato para hacer tránsito a una producción a nivel industrial. Sin embargo, para poder lograr su

escalamiento, es necesario comprender por completo su funcionamiento, lo cual exige investigar aspectos relacionados con los mecanismos que afectan sus propiedades ópticas, eléctricas, morfológicas y estructurales. La búsqueda de alternativas para mejorar la estabilidad tanto de los materiales precursores como de la celda, es también un aspecto de gran importancia. El buen rendimiento de las celdas híbridas fabricadas empleando la perovskita como capa activa se debe a sus destacadas propiedades ópticas y eléctricas. En particular, las perovskitas se caracterizan por tener un alto coeficiente de absorción y un transporte eficiente tanto de huecos como de electrones. En el presente trabajo describimos las condiciones de crecimiento de películas delgadas de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  (MAPI) con estructura perovskita, mediante evaporación secuencial de sus precursores: yoduro de plomo ( $\text{PbI}_2$ ) y yoduro de metilamina (MAI). El proceso de evaporación fue controlado automáticamente por un sistema de instrumentación virtual (VI), que permite regular la temperatura de cada fuente de evaporación mediante algoritmos de control PID y PWM desarrollados con el software LabView. Los módulos Field Point 1000, TC120 y una tarjeta USB6341 de National Instrument fueron usados como hardware. Además, el sistema tiene facilidades para procesamiento de datos y monitoreo en tiempo real del estado del proceso. Se llevaron a cabo medidas de difracción de rayos X sobre las muestras preparadas, los difractogramas obtenidos presentan reflexiones en  $2\theta=14.22^\circ$ ,  $28.66^\circ$  y  $32.14^\circ$  característicos del MAPI en su estructura cristalina tetragonal. También se estudió la influencia de los parámetros de deposición sobre las propiedades ópticas, para ello se emplearon medidas de transmitancia y reflectancia espectral; a partir de estas medidas se determinó el GAP óptico de las películas delgadas de MAPI, que resultó ser  $1,6\text{eV}$ ; lo que es consistente con el valor reportado en la literatura. Se comprobó que el método de evaporación secuencial implementado permite preparar, con un alto grado de reproducibilidad, películas delgadas de MAPI con características adecuadas para ser utilizadas como capa activa de una celda solar.

## Synthesis and characterization of calcium phosphate derived from fish otoliths

## Síntesis y caracterización de fosfato de calcio derivado de otolitos de pescado

N D Montañez Supelano<sup>1</sup>, H A Estupiñan Duran<sup>2</sup>, A A Sandoval Amador<sup>1</sup> and D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

Email: nerlym85@gmail.com

**Abstract.** Calcium phosphates are bioceramics that have been widely used as bone substitutes because they promote the formation of bone on their surface and can improve healing of bone. Hydroxyapatite HA (calcium/phosphorus ratio of 1.67) and tricalcium phosphate TCP (calcium/phosphorus ratio of 1.50) are the most common calcium phosphates. Natural materials have begun to be tested to make HA or TCP such as shells of cardiidae (family of mollusks) and eggshells. The calcium phosphate obtained has a high ability to precipitate apatite. In this work, the mixed phase ceramic of beta-tricalcium phosphate/hydroxyapatite ( $\beta$ -TCP/HA) was synthesized by aqueous precipitation from fish otoliths, which are monomineralic species composed of aragonite. Otoliths of the specie *Plagioscion squamosissimus*, commonly called the river croaker, were used. Techniques such as DRX, Raman spectroscopy and SEM-EDS were used to characterize the raw material and the obtained material. X-ray diffraction analysis revealed the presence of two crystalline phases of calcium phosphates with 86.2% crystallinity. SEM micrographs showed agglomeration of particles with porous structure and submicron particle sizes.

**Resumen.** Los fosfatos de calcio son biocerámicos que se han usado ampliamente como sustitutos óseos porque promueven la formación de hueso en su superficie y pueden mejorar la curación de hueso. La hidroxiapatita HA (con relación calcio/fosforo de 1.67) y el fosfato tricálcico TCP (con relación calcio/fosforo de 1.50) son los fosfatos de calcio más comunes. Materiales de origen natural se han empezado a probar para fabricar HA o TCP tales como conchas de cardiidae (familia de moluscos) y cáscaras de huevo. El fosfato de calcio obtenido tiene alta habilidad de precipitar apatita. En este trabajo, se sintetizó por precipitación acuosa un cerámico de fase mixta de fosfato tricálcico  $\beta$ /hidroxiapatita ( $\beta$ -TCP/HA) a partir de otolitos de peces, las cuales son especies monominerálicas compuestas de aragonita. Se usaron otolitos de la especie *Plagioscion squamosissimus*, llamado comúnmente como corvina de río. Técnicas como DRX, espectroscopia Raman y SEM-EDS, se utilizaron para caracterizar la materia prima y el material obtenido. El análisis por difracción de rayos X reveló la presencia de dos fases cristalinas de fosfatos de calcio con 86.2% de cristalinidad. Las micrografías SEM mostraron aglomeración de partículas con estructura porosa y tamaños de partícula submicrónica.

## Synthesis and Characterization of Cerium doped LaFeO<sub>3</sub> at different concentrations

## Síntesis y caracterización de LaFeO<sub>3</sub> dopadas con cerio a diferentes concentraciones

J M Oviedo Cuéter<sup>1</sup>, S A Caballero<sup>1</sup> and L C Sanchez Pacheco<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

Email: ocjm19@hotmail.com

**Abstract.** Lanthanum Ferrites doped with Cerium at 1, 3 and 5% at. were synthesized by Sol-Gel method with calcination temperature of 900°C. The synthesized samples were studied using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM-EDS), and magnetic measurements. The identified phase for samples corresponds to an orthorhombic perovskite structure with Pbnm (# 62) space group without the presence of impurity phases. Changes in structural, morphological and magnetic properties of samples were observed, associated with the presence of Cerium.

**Resumen.** Se sintetizaron Ferritas de Lantano dopadas con Cerio al 1, 3 y 5% at. por el método Sol-Gel con temperatura de calcinación de 900°C. Las muestras sintetizadas fueron estudiadas utilizando difracción de rayos X (XRD), microscopía electrónica de barrido (SEM-EDS) y medidas magnéticas. La fase identificada para las muestras corresponde a una estructura perovskita ortorrombica con grupo espacial Pbnm(# 62) sin presencia de fases de impureza. Fueron observados cambios en las propiedades estructurales, morfológicas y magnéticas en las muestras, asociados con la presencia del Cerio.

## Synthesis and characterization of indium oxide (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) doped with transition metals

## Síntesis y caracterización de óxido de indio (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) dopado con metales de transición

L C Sanchez Pacheco<sup>1</sup>, J M Oviedo Cuéter<sup>1</sup> and O Arnache Olmos<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

Email: [luiscarlos@correo.unicordoba.edu.co](mailto:luiscarlos@correo.unicordoba.edu.co)

**Abstract.** Indium oxide (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) in bixbyite type cubic phase (space group no.206) doped with transition metals (Fe, Mn, Co, Cu and Ni) were synthesized using dopant concentrations of 5% by the solid state reaction method, and subsequent calcination temperatures of 900°C and 1100°C for 12 hours, respectively. Samples were structurally characterized by the technique of X-ray diffraction (XRD), and MAUD and Powder Cell (PCW) programs for analyzing diffractograms were used, which confirmed that all samples exhibit the corresponding bixbyite type cubic phase of In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, without evidence of impurities or presence of secondary phases in the compounds. Variations in structural properties of In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, such as, changes in the lattice constant, cell volume, crystallite size and microtensions, due to the inclusion of the ions of the different types of dopants. Finally, by optical transmittance measurements were estimated optical band gap for the each of the synthesized samples, indicating the contribution of each of the dopants.

**Resumen.** Óxido de indio (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) en la fase cubica tipo bixbyite (grupo espacial no.206) dopado con metales de transición (Fe, Mn, Co, Cu y Ni) fueron sintetizados utilizando concentraciones de dopante del 5% mediante el método de reacción de estado sólido, y con sucesivas temperaturas de calcinación de 900°C y 1100°C durante 12 horas, respectivamente. Se caracterizaron estructuralmente las muestras a través de la técnica de difracción de rayos X (XRD), y se utilizaron los programas MAUD y Powder Cell (PCW) para el análisis de los difractogramas, corroborando que todas las muestras exhiben la correspondiente fase cúbica tipo bixbyite de In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, sin evidencias de impurezas o presencia de fases secundarias en los compuestos. Se presentaron variaciones en las propiedades estructurales de In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, tales como, modificaciones en la constante de red, volumen de la celda, tamaño del cristalito y microtensiones, debido a la inclusión de los iones de los diferentes tipos de dopantes. Finalmente, mediante medidas de transmitancia óptica fueron estimados los band gap ópticos para cada una de las muestras sintetizadas, evidenciando la contribución de cada uno de los dopantes.

## Synthesis and characterization of the $\text{Bi}_{0.94}\text{Gd}_{0.06}\text{FeO}_3$ system

## Síntesis y caracterización del sistema $\text{Bi}_{0.94}\text{Gd}_{0.06}\text{FeO}_3$

L M Ramirez Guzman<sup>1</sup>, A F Cruz Pacheco<sup>1</sup>, J A Gómez<sup>1</sup> and C A Parra Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: milenita12091@hotmail.com

**Abstract.** Multiferroic materials based on  $\text{BiFeO}_3$  oxides, are currently one of the most studied due to its possible applications at room temperature, since they have an antiferromagnetic behavior at a high Neel temperature ( $T_N=370^\circ\text{C}$ ), and a ferroelectric behavior with a high Curie temperature ( $T_c=810^\circ\text{C}$ ). One of the main challenges in the synthesis of this material consists in the elimination of secondary phases, which cause a current loss resulting in a weak ferroelectric behavior. In this way, in order to improve the magnetic and electrical properties of bismuth ferrites, numerous studies have reported the replacement of divalent or trivalent metal ions at the bismuth and / or iron site, achieving relevant results, especially when the substitutions include trivalent rare earth ions such as Eu, Tb, Dy and Gd. In this sense, the current work reports the synthesis and characterization of the  $\text{Bi}_{0.94}\text{Gd}_{0.06}\text{FeO}_3$  system, obtained by the solid state reaction method. Initially, stoichiometric amounts of  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Gd}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  were weighed and dried in an oven at  $200^\circ\text{C}$  for 12 hours, the dry oxides were ground in an agate mortar for 4 hours and calcined at  $700^\circ\text{C}$  for 12 hours. The calcined sample were milled for 3 hours and compressed to obtain pellets of 10mm diameter using a uniaxial pressure of 5.0MPa, the sample were then sintered at  $800^\circ\text{C}$  for 20 hours in a programmable tubular oven. The obtained oxide were characterized by X-ray diffraction (XRD) using the  $\text{CuK}\alpha$  radiation ( $1.54\text{\AA}$ ) between  $10$  and  $90^\circ$  and refined using the Rietveld method. The results allowed to identify perovskite structure in the materials with a rhombohedral crystalline system, space group  $R3c$  (161) and cell parameters  $a=b=5.58$  and  $c=13.90\text{\AA}$ , being clear that the crystalline structure is strongly dependent on the  $\text{Bi}^{3+}$  ions that occupy the cube-octahedral positions within the perovskite in octahedral coordination. A decrease in the network parameters was observed when Gd cations ( $1.05\text{\AA}$ ) were replaced with Bi ( $1.17\text{\AA}$ ) cation, due to the difference of ionic radii. The magnetization analysis between 500 and 1000Oe depending on the applied magnetic field and the temperature between 50 and 300K, made in a vibrating sample magnetometer (VSM), confirmed that the solids exhibit a ferromagnetic behavior, with increase of the remaining magnetization ( $M_r$ ), the coercive field ( $H_c$ ) and magnetic susceptibility when the concentration of gadolinium increase, which demonstrates the effectiveness of the synthesis procedure for potential technological applications.

**Resumen.** Los materiales basados en  $\text{BiFeO}_3$  son en la actualidad uno de los multiferróicos más estudiados debido a sus posibles aplicaciones a temperatura ambiente, pues tienen un comportamiento anti ferromagnético a una temperatura de Néel alta ( $T_N=370^\circ\text{C}$ ) y un comportamiento ferroeléctrico con una alta temperatura de Curie ( $T_c=810^\circ\text{C}$ ). Uno de los principales desafíos en la síntesis de este material, consiste en la eliminación de las fases secundarias, que originan una pérdida de corriente que da como resultado un comportamiento ferroeléctrico débil. De esta forma, y con el fin de mejorar las propiedades magnéticas y

eléctricas de las ferritas de bismuto, numerosos trabajos han reportado la sustitución de iones metálicos divalente o trivalentes en el sitio del bismuto y/o hierro, logrando resultados relevantes, principalmente cuando las sustituciones incluyen iones de tierras raras trivalentes como Eu, Tb, Dy y Gd. En este sentido, el presente trabajo reporta la síntesis y caracterización del sistema  $\text{Bi}_{0.94}\text{Gd}_{0.06}\text{FeO}_3$ , sintetizado por el método de reacción de estado sólido. Inicialmente, cantidades estequiométricas de  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Gd}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  fueron pesadas y secadas en un horno a  $200^\circ\text{C}$  por 12 horas, los óxidos secos se molturaron en un mortero de ágata durante 4 horas y se calcinaron a  $700^\circ\text{C}$  durante 12 horas. La muestra calcinada se molturo durante 3 horas y se pastillo para obtener comprimidos de 10mm de diámetro usando una presión uniaxial de 5.0Mpa, posteriormente las muestras se sinterizaron a  $800^\circ\text{C}$  por 20 horas, en un horno tubular programable. El óxido obtenido se caracterizo por difracción de rayos X (XRD) utilizando la radiación  $\text{CuK}\alpha$  ( $1.54\text{\AA}$ ) entre  $10$  y  $90^\circ$  y se refino utilizando el metodo Rietveld. Los resultados permitieron identificar estructura tipo perovskita en el material con un sistema cristalino romboédrico, grupo espacial  $R3C$  (161) y parámetros de celda  $a=b=5.58$  y  $c=13.90\text{\AA}$ , siendo claro que la estructura cristalina es fuertemente dependiente de los iones  $\text{Bi}^{3+}$  que ocupan posiciones cubo-octaédricas dentro de la perovskita en coordinación octaédrica. Se evidenció una disminución de los parámetros de red cuando se sustituyeron en mayor proporción los cationes Gd ( $1.05\text{\AA}$ ) por Bi ( $1.17\text{\AA}$ ), debido a la diferencia de radios iónicos. Los análisis de magnetización entre 500 y 1000Oe en función del campo magnético aplicado y de la temperatura entre 50 y 300K realizados en un magnetómetro de muestra vibrante (VSM), confirmaron que los sólidos exhiben un comportamiento ferromagnético, con aumento de la magnetización remanente ( $M_r$ ), el campo coercitivo ( $H_c$ ) y la susceptibilidad magnética cuando se aumenta la concentración de gadolinio, lo cual evidencia la efectividad del procedimiento de síntesis utilizado para potenciales aplicaciones tecnológicas.

## Synthesis and characterization structural, optical and electrical of CU<sub>2</sub>ZNSNS<sub>4</sub> (CZTS) thin films prepared by co-evaporation using a novel procedure

## Síntesis y caracterización estructural, óptica y eléctrica de películas delgadas Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> (CZTS) preparadas por co-evaporación usando un nuevo procedimiento

L A Carrero Bermúdez<sup>1</sup>, R Moreno Mendoza<sup>1</sup> and G Gordillo Guzmán<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: lacarrerob@unal.edu.co

**Abstract.** The present work describes the Synthesis and characterization structural, optical and electrical of Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> (CZTS) thin films prepared by co-evaporation using a novel procedure. We sintered samples with molar variation Cu/(Sn+Zn) between 0.75 and 1.3. The Rietveld refinement of X-ray diffraction (XRD) patterns showed that this composite crystallizes in a tetragonal structure kesterite-type with space group I-42m (#121). We found an increasing behavior of the parameters lattice and crystallite size with increment of Cu. The identification of second phases was performed with Raman spectroscopy. Using the R. Swanepoel method we obtain optical constants such as: the index of refraction, thickness, absorption index, extinction coefficient and gap of optical energy (gap). The electrical characterization was obtained from measures of resistance as a function of temperature and was observed a typical behaviour of semiconductor.

**Resumen.** El presente trabajo describe la síntesis y caracterización estructural, óptica y eléctrica de películas delgadas Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> (CZTS) preparadas por co-evaporación utilizando un procedimiento novedoso. Se sinterizaron muestras con variación molar Cu/(Sn+Zn) entre 0.75 y 1.3. El refinamiento Rietveld a partir de la difracción de rayos X (XRD) mostró que este compuesto cristaliza en una estructura tetragonal tipo kesterita con el grupo espacial I-42m (#121). Se encontró un comportamiento creciente de los parámetros de red y cristalito, con incremento de Cu. La identificación de las fases secundarias se realizó con espectroscopia Raman. Utilizando el método de R. Swanepoel se obtienen constantes ópticas tales como: el índice de refracción, el espesor, el índice de absorción, el coeficiente de extinción y el intervalo de energía óptica (gap). La caracterización eléctrica se obtuvo a partir de medidas de resistencia en función de la temperatura y se observó un comportamiento típico del semiconductor.



## Technological characterization test implementation as a solution for the pathologies founded in coating and finishing works in constructions

## La implementación de ensayos de caracterización tecnológica como solución a patologías en las obras de revestimiento y acabado de las construcciones

D C Rocha Vargas<sup>1</sup>, A G Costa<sup>2</sup> and J E Becerra Becerra<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Santo Tomás, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Federal de Minas Gerais, Minas Gerais, Brasil

Email: danielarocha@usantotomas.edu.co

**Abstract.** Since ancient times, human beings have tried to improve their life quality in many ways. They have taken advantage of several elements to reach this goal; for instance, the continuous development of the construction field, especially on the big construction projects which generate huge impact every day. Natural resources such as stones have been used as structural materials and as coating and finishing of surfaces like facades and floors. Therefore, it is important for a Civil Engineer to have outstanding materials with excellent aesthetic and mechanical properties, which not only decorate the construction but also, have functionality and durability properties. Materials from these coating and finishing works have shown different pathologies through time, as a result of their incorrect use. It is mainly caused by the unawareness of their mineral composition and mechanical properties. Therefore, new testing methods have been designed in some countries in order to determine the main properties of these rocks related to their mineralogy and mechanical properties. These tests are called “technologic characterization tests”. Their main goal is to assess the best behavior of the rocks according to the different environments where they are exposed. However, in Colombia has not been implemented any type of these tests and standards. As a consequence, the use of these rocks is based on aesthetics criterion. In this sense, the research project called “physical-mechanical, chemical and mineralogical characterization of Guadalupe sandstone used as construction materials in the free zone of Tocancipá-Cundinamarca”, from the Civil Engineering Faculty at Universidad Santo Tomás intends to show the importance of the implementation of the technologic characterization Tests. It also aims to create national standards to improve the use of this ornamental stones.

**Resumen.** Desde la antigüedad el hombre ha buscado mejorar su calidad de vida de muchas formas haciendo uso de innumerables elementos; un ejemplo de ello es el desarrollo en la construcción de grandes obras civiles que día a día impactan y generan innovación. Para estas ha hecho uso de materiales naturales como las rocas, en elementos estructurales y como revestimiento y acabado de fachadas y pisos. Por tal motivo, es de gran importancia para el Ingeniero Civil contar con materiales que se destaquen por sus cualidades estéticas y

características mecánicas que permitan, además de embellecer la construcción, que tengan propiedades de durabilidad y funcionalidad. Los materiales de estas obras de revestimiento y acabado han mostrado distintos tipos de problemas patológicos a través del tiempo, resultado de la aplicación incorrecta de las mismas debido al desconocimiento de su composición mineralógica y propiedades mecánicas. Por lo anterior, en algunos países se han diseñado métodos de ensayo, a través de los cuales se determinan las principales características de estas rocas, que tienen que ver con su mineralogía y sus propiedades mecánicas y reciben el nombre de “ensayos de caracterización tecnológica”. Su principal objetivo es evaluar los mejores desempeños de las rocas ornamentales y de revestimiento según los ambientes a los que se puedan encontrar expuestas, previniendo problemas patológicos. Sin embargo, en Colombia aún no se ha implementado este tipo de normas y especificaciones de ensayo por lo que la utilización de las rocas ornamentales y de revestimiento (Fachadas y pisos) se hace partiendo de criterios estéticos de las mismas. En este sentido, el proyecto de investigación de la Facultad de Ingeniería Civil de la Universidad Santo Tomás llamado “caracterización físico-mecánica, química y mineralógica de areniscas del grupo Guadalupe utilizadas como materiales de construcción en la zona franca de Tocancipá-Cundinamarca”, en el marco de su desarrollo y avance busca dar a conocer la importancia de implementar los ensayos de caracterización tecnológica en las rocas utilizadas como material de revestimiento en las obras de construcción que se ejecutan en Colombia, y la necesidad de crear normas técnicas que contengan las especificaciones para la aplicación de los mismos.

# High-temperature thermal behaviour of ammonium dihydrogen phosphate

## Comportamiento térmico a altas temperaturas del fosfato diácido de amonio

A Pardo<sup>1</sup>, J Romero<sup>1</sup> and E Ortiz<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia

E-mail: [adavidpardo@mail.uniatlantico.edu.co](mailto:adavidpardo@mail.uniatlantico.edu.co)

**Abstract.** For over five decades, the high-temperature behaviour of ammonium dihydrogen phosphate,  $(\text{NH}_4)\text{H}_2\text{PO}_4$ , has been a controversial subject; while first works associate the ionic conductivity increment at around  $T_i=190^\circ\text{C}$  to a physical transformation (structural phase transition), later researches support the chemical nature of the transformation. However, nowadays, the origin of the ionic conductivity increment is still not clear. To provide a possible interpretation of this phenomena, a careful high-temperature thermal examination of this acid salt by means of differential scanning calorimetry (DSC), thermogravimetric analysis (TG) and mass spectroscopy (MS), was performed. The results show that when this acid salt is heated through around  $T_i$ , a chemical decomposition into phosphoric acid ( $\text{H}_3\text{PO}_4$ ) and ammonia ( $\text{NH}_3$ ) takes place. Taking into account that  $\text{H}_3\text{PO}_4$  exhibits conductivity values of around  $10^{-3}\text{S/cm}$ , our results suggest that the observed conductivity increase at around this temperature is an exclusive consequence of its appearance as one of the decomposition products.

**Resumen.** Por más de cinco décadas, el comportamiento del fosfato diácido de amonio,  $(\text{NH}_4)\text{H}_2\text{PO}_4$ , a altas temperaturas ha constituido un asunto controversial; mientras en primeros trabajos el incremento en la conductividad iónica, alrededor de  $T_i=190^\circ\text{C}$ , fue asociado a una transformación física (transición de fase estructural), investigaciones posteriores afirman que la naturaleza de la transformación es química. Sin embargo, en la actualidad, aún no se conoce con claridad la causa del incremento en la conductividad iónica. Para presentar una posible interpretación a este fenómeno, se realizó un estudio cuidadoso del comportamiento de esta sal, a altas temperaturas, recurriendo a las técnicas térmicas de caracterización calorimetría diferencial de barrido (DSC), análisis termogravimétrico (TG) y espectroscopia de masas (MS). Los resultados muestran que alrededor de  $T_i$  esta sal descompone en ácido fosfórico ( $\text{H}_3\text{PO}_4$ ) y amonio ( $\text{NH}_3$ ). Teniendo en cuenta que  $\text{H}_3\text{PO}_4$  exhibe valores de conductividad de aproximadamente  $10^{-3}\text{S/cm}$ , nuestros resultados sugieren que el incremento en la conductividad observado alrededor de esta temperatura es consecuencia exclusiva de su aparición como uno de los productos de descomposición.

## **Modeling, Simulation and Diagnostics – MSD**

## **Modelado, Simulación y Diagnóstico - MSD**

## 2D and 3D virtual interactive laboratories of physics on Unity platform

### Laboratorios virtuales interactivos de física en 2D y 3D usando la plataforma Unity

J H Escobar Acosta<sup>1</sup>, J R Beltrán Sánchez<sup>1</sup>, H Sánchez Pérez<sup>1</sup>, J J De La Hoz Villar<sup>1</sup> and J D González Acosta<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia

Email: josehenrye@gmail.com

**Abstract.** Using the cross-platform game engine Unity, we develop virtual laboratories for PC, consoles, mobile devices and website as an innovative tool to study physics. There is extensive uptake of ICT in the teaching of science and its impact on the learning, and considering the limited availability of laboratories for physics teaching and the difficulties this causes in the learning of school students, we design the virtual laboratories to enhance student's knowledge of concepts in physics. To achieve this goal, we use Unity due to provide support bump mapping, reflection mapping, parallax mapping, dynamics shadows using shadows maps, full-screen post-processing effects and render-to-texture. Unity can use the best variant for the current video hardware and, if none are compatible, to use an alternative shader that may sacrifice features for performance. The control over delivery to mobile devices, web browsers, consoles and desktops is the main reason Unity is the best option among the same kind cross-platform. Supported platforms include Android, Apple TV, Linux, iOS, Nintendo 3DS line, macOS, PlayStation 4, Windows Phone 8, Wii but also an asset server and Nvidia's PhysX physics engine which is the most relevant tool on Unity for our PhysLab.

**Resumen.** Usando el motor de juego de la plataforma Unity, nosotros desarrollamos laboratorios virtuales para PC, consolas, dispositivos móviles y navegador web como una herramienta innovadora para estudiar física. Existe una extensa aceptación de las TIC en la enseñanza de la ciencia y su impacto en el aprendizaje y teniendo en cuenta la limitada disponibilidad de laboratorios para la enseñanza de la física y las dificultades que esto provoca en el aprendizaje de los estudiantes de las escuelas, diseñamos los laboratorios virtuales para mejorar el conocimiento conceptos de la física en los estudiantes. Para lograr este objetivo, utilizamos Unity debido a la provisión de mapas de relieve de apoyo, mapeo de reflexión, mapeado de paralaje, sombras dinámicas usando mapas de sombras, efectos de postprocesamiento a pantalla completa y render-para-textura. Unity puede utilizar la mejor variante para el hardware de vídeo actual y, si no hay compatibilidad, utilizar un sombreador alternativo que puede sacrificar características para el rendimiento. El control sobre la entrega a dispositivos móviles, navegadores web, consolas y escritorios es la principal razón por la que Unity es la mejor opción entre el mismo tipo multiplataforma. Las plataformas soportadas incluyen Android, Apple TV, Linux, iOS, línea Nintendo 3DS, MacOS, PlayStation 4, Windows Phone 8, Wii, pero también

un servidor de activos y el motor PhysX de Nvidia PhysX que es la herramienta más relevante en Unity para nuestro PhysLab.

## Adsorption of arsenate on Fe-(hydr) oxide

## Adsorción de arseniato sobre Fe-(hidr) óxido

N Acelas<sup>1</sup> and E Flórez Yepes<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Medellín, Medellín, Colombia

Email: nyacelas@udem.edu.co

**Abstract.** Adsorption using metal oxide materials has been demonstrated to be an effective technique to remove hazardous materials from water, due to its easy operation, low cost, and high efficiency. The high amount of oxyanions in aquatic ecosystems causes serious pollution problems. Removal of arsenate ( $\text{H}_2\text{AsO}_4^-$ ), is one of the major concerns since it is a highly toxic anion for life. Within the metal oxides, the iron oxide is considered as a suitable material for the elimination of oxyanions. The adsorption of  $\text{H}_2\text{AsO}_4^-$  on Fe-(hydr) oxide is through the formation of inner or outer sphere complexes. However, through experimental techniques, it is not possible to have a complete characterization of all individual adsorbed complexes since what is obtained is a mix of them. On the other hand, since the adsorption process occurs in the solid/liquid interface, pH is one of the main factors that affect this process and it is a very important parameter to study. In this work, through computational methods, a complete characterization of the adsorbed surface complexes was performed. Three different pH conditions were simulated (acid, neutral and basic), and it was found that the thermodynamic favorability of the different adsorbed complexes was directly related to the pH, where bidentate complex (BB) was the most thermodynamically favorable complex with an adsorption energy of  $-125.4\text{kJ/mol}$  under acidic conditions.

**Resumen.** La adsorción usando materiales basados en óxidos metálicos ha demostrado ser una técnica efectiva para remover contaminantes desde el agua, debido a su fácil operación, bajo costo y alta eficiencia. La alta cantidad de oxianiones en los ecosistemas acuáticos genera graves problemas de contaminación. La eliminación de arseniato ( $\text{H}_2\text{AsO}_4^-$ ), es una de las mayores preocupaciones, dado que es un anión altamente tóxico para la vida. Dentro de los óxidos metálicos, el óxido de hierro se plantea como un material adecuado para la eliminación de dicho oxianión. La adsorción de  $\text{H}_2\text{AsO}_4^-$  sobre el Fe(hidr)óxido se plantea a través de la formación de complejos de esfera interna o externa. Sin embargo, a través de técnicas experimentales no es posible realizar una caracterización completa de los complejos individuales adsorbidos ya que lo que se obtiene es una mezcla de los mismos. Por otra parte, dado que el proceso de adsorción se da en la interfase sólido/líquido el pH es uno de los factores que más afecta dicho proceso y por tanto es un parámetro muy importante a estudiar. En este trabajo, a través de métodos computacionales se realizó la caracterización completa de los complejos superficiales adsorbidos simulando tres condiciones de pH (ácido, neutro y básico). Se encontró que la favorabilidad termodinámica de los diferentes complejos adsorbidos está directamente relacionada con el pH, siendo el complejo bidentado (BB) el más favorable termodinámicamente con una energía de adsorción de  $-125.4\text{kJ/mol}$  a condiciones ácidas.

## Applicability of TDGL theory in superconductors

## Aplcabilidad de la teoria TDGL en supeconductores

**J J Barba Ortega<sup>1,2</sup>, C Aguirre<sup>1</sup> and M Rincon Joya<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Foundation of Researches in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: josejbarba@gmail.com

**Abstract.** The time dependent Ginzburg-Landau (TDGL) theory is commonly used at different temperatures, but strictly speaking it is not applicable anywhere, except the vicinity of the critical temperature. Some necessary condition requires that the quasi-particle excitation should remain essentially in equilibrium with the heat bath. It can normally be fulfilled only for the so-called gapless superconductivity and can be realized either in the presence of magnetic impurities or in the limit of strong inelastic electron-phonon relaxation. As a result of this consideration, we performed a proper discussion of the applicability of the TDGL theory in some examples of scientific interest.

**Resumen.** La teoría Ginzburg-Landau dependiente del tiempo (TDGL) es comúnmente utilizada a diferentes temperaturas, pero estrictamente hablando, solo se puede aplicar en la vecindad de la temperatura crítica. Una condición necesaria es que las excitaciones de las cuasi-partícula permanezcan esencialmente en equilibrio con el baño térmico. Esta condición solo puede cumplirse la llamada superconductividad sin bandas y puede realizarse ya sea en presencia de impurezas magnéticas o en el límite de relajación fuerte inelástica electrón-fonón. Como resultado de esta consideración, discutiremos la aplicabilidad de la teoría TDGL en algunos ejemplos de interés científico.



## Artificial impurities in a superconducting flat: resistive response

## Impurezas artificiales en una placa superconductora: respuesta resistiva

J J Barba Ortega<sup>1,2</sup>, C Aguirre<sup>1</sup> and M Rincon Joya<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Foundation of Researches in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: josejbarba@gmail.com

**Abstract.** The influence of the size, geometry and dimensionality of 2D (square/rectangular) and 1D (linear) trench/barrier on the resistive response in a superconducting flat in presence of an external applied dc current at zero applied magnetic field is analyzed. We studied the periodical oscillations in the voltage-time curve (due to the Vortex-anti-Vortex (V-aV) pair nucleation), and the current-voltage curve to find the value of the applied current  $I_f$  and frequencies  $w$  which the first V-aV pair occurs. We found that  $I_f$  and  $w$  depends of the nature of the defects.

**Resumen.** La influencia del tamaño, geometría y naturaleza de 2D (cuadrado/rectangular) y 1D (lineal) trinchera/barrera sobre la respuesta resistiva en una placa fina superconductora en presencia de una corriente aplicada dc a campo magnético cero es analizada. Estudiamos las oscilaciones periódicas en la curva voltaje-tiempo (debido a la nucleación de pares vórtices-anti-vórtices (V-aV)), y la curva corriente-voltaje para encontrar el valor de la corriente aplicada  $I_f$  y frecuencia  $w$  en la cual el primer par V-aV ocurre. Encontramos que  $I_f$  y  $w$  dependen de la naturaleza de los defectos.

## **Building a 3D virtual simulator of the reactor used for superficial modification of metals**

## **Construcción del simulador virtual 3D de un reactor usado en la modificación superficial de metales**

**P A Ruiz-Martínez<sup>1</sup>, L A Saavedra-Duarte<sup>1</sup>, A Angarita-Jerardino<sup>1</sup>, E D V-Niño<sup>2</sup>, F H Vera Rivera<sup>1,2</sup> and H J Dulce-Moreno<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: fredyhumbertovera@ufps.edu.co

**Abstract.** Design and modeling software has contributed to innovation and technological development, due to the good of flexibility and integration capabilities, providing efficiency and reliability to users. In the present work, the design and 3D model of a reactor used for the surface modification of metallic materials by ionic implantation are realized, where the simulation of the most relevant factors and elements are presented to scale. The animation was made using the Unity 3D game development platform.

**Resumen.** Los softwares de diseño y modelado han contribuido con el desarrollo tecnológico e innovación, debido a las buenas capacidades de flexibilidad e integración, proporcionando eficiencia y fiabilidad a los usuarios. En el presente trabajo, se realiza el diseño y modelo 3D de un reactor utilizado en la modificación superficial de materiales metálicos mediante la técnica de implantación iónica, donde la simulación de los factores y elementos más relevantes son presentados a escala. La animación fue efectuada con la plataforma de desarrollo de juegos Unity 3D.

# Critical and compensation behaviors of a mixed spin-2-spin-5/2 Ising ferrimagnetic system

## Comportamientos críticos y de compensación de un sistema ferrimagnético de Ising mixto de espines 2 y 5/2

N De la Espriella Vélez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

Email: ndelae52@gmail.com

**Abstract.** We perform Monte Carlo simulations to analyze the magnetic properties of a mixed Ising model, where spins  $S$  that can take 5 values,  $0, \pm 1, \pm 2$ , alternate on a square lattice with spins  $Q$  that can take 6 values,  $\pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ . The Hamiltonian of the model includes an antiferromagnetic interaction between the  $S$  and  $Q$  spins, nearest neighbors on the lattice, a ferromagnetic interaction between the  $S$  spins, next-nearest neighbors on the lattice, and a crystal field. We found that the system presents compensation temperatures in a wide range of the parameters. At the compensation temperature, the total magnetization is zero but, contrary to what happens at the critical temperature, the system remains ordered. These temperatures have important technological applications, particularly in the field of thermo-magnetical recording. We calculate the finite temperature phase diagram of the model. We found that the presence of the compensation temperature is strongly dependent on the next-nearest neighbor interaction term between the  $S$  spins, while its value can be calibrated by changing the crystal field.

**Resumen.** Desarrollamos simulaciones Monte Carlo para analizar las propiedades magnéticas de un modelo de Ising mixto, donde espines que pueden tomar 5 valores,  $0, \pm 1, \pm 2$ , alternan sobre una red cuadrada con espines  $Q$  que pueden tomar 6 valores,  $\pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ . El Hamiltoniano del modelo incluye una interacción antiferromagnética entre los espines  $S$  y  $Q$ , a primeros vecinos sobre la red, una interacción ferromagnética entre los espines  $S$ , segundos vecinos sobre la red, y un campo cristalino. Hallamos que el sistema presenta temperaturas de compensación en un amplio rango de los parámetros. En esta temperatura la magnetización total es cero, pero contrario a lo que pasa en la temperatura crítica, el sistema permanece ordenado. Estas temperaturas tienen importantes aplicaciones tecnológicas, particularmente en el campo de las grabaciones termomagnéticas. Calculamos los diagramas de fase a temperatura finita del modelo. Hallamos que la presencia de la temperatura de compensación es fuertemente dependiente del término de interacción a segundos vecinos entre los espines  $S$ , en la cual su valor puede ser calibrado cambiando el campo cristalino.

# Electrons beam acceleration in a TE113 cylindrical cavity affected by a static inhomogeneous magnetic field

## Aceleración de electrones en una cavidad cilíndrica usando el modo TE113 afectado por un campo magnético estático inhomogéneo

V E Vergara Diaz<sup>1</sup>, J R Beltrán Sánchez<sup>1</sup>, E A Orozco Ospino<sup>2</sup> and J D González Acosta<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: [viverdiz@gmail.com](mailto:viverdiz@gmail.com)

**Abstract.** The relativistic dynamics of an electrons beam accelerated in a cylindrical cavity mode TE113 in the presence of a static inhomogeneous magnetic field is studied. This type of acceleration is known as Spatial AutoResonance Acceleration (SARA). The magnetic field profile is such that it keeps the phase difference between the electric microwave field and the electron velocity vector within the acceleration phase band. To study the self consistent dynamic of the electrons beam a full electromagnetic particle-in-cell code is used. Numerical experiments with 2.45GHz microwave fields and an amplitude of 10kV/cm show that it is possible accelerate the electrons up to energies of the order of 300keV. This energy is about of 30% higher than those obtained in previous studies by using the TE112 mode.

**Resumen.** La dinámica relativista de un haz de electrones acelerados en un modo TE113 cavidad cilíndrica en presencia de un campo magnético no homogéneo estática es estudiada. Este tipo de aceleración se conoce como Aceleración de AutoResonancia espacial (SARA). El perfil de campo magnético es tal que se mantiene la diferencia de fase entre el campo eléctrico de microondas y el vector velocidad de los electrones dentro de la banda de fase de aceleración. Para estudiar la dinámica auto-consistente del haz de electrones se utiliza el código electromagnético de particle-in-cell. Experimentos numéricos con los campos de microondas de 2,45GHz y una amplitud de 10kV/cm muestran que es posible acelerar los electrones hasta energías del orden de 300keV. Esta energía es de aproximadamente 30% o superiores a los obtenidos en estudios anteriores utilizando el modo TE112.

## Independent component analysis to the signal processing of Raman spectra of human breast cancerogenic tissue

## Análisis de componentes independientes para el procesamiento de la señal del espectro Raman del tejido cancerígeno del seno humano

J Fernandez<sup>1</sup>, A D Miranda Mercado<sup>1</sup> and C J Uribe Pérez

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: janethfpinto@gmail.com

**Abstract.** The worldwide increasing in the number of incidence and mortality cases of breast cancer impulse the scientific community to research about cancer evolution and its early detection. A technique to analyze specific biochemical alterations into a tumor is micro-Raman spectroscopy. The micro-Raman technology lets to identify biochemical changes in biological tissues and has been used to analyze in-vivo and ex-vivo sections of breast tissue. In this paper, a study of breast cancer samples in Formalin-Fixed Paraffin Processed (FFPP) with Raman spectroscopy is reported. Distinct zones into FFPP samples were selected, and Raman spectra were collected. The measures showed overlapped spectra due to glass, hematoxylin, eosin, resin and tissue. Raman signal of the individual components, except the tissue spectra, were measured and Independent Component Analysis (ICA) to obtain the Raman spectrum of tissue was implemented. The more significant result was the extraction of tissue Raman spectra from the overlapped spectra.

**Resumen.** El aumento en el número de casos en incidencia y mortalidad del cáncer de mama a nivel mundial impulso la investigación en la comunidad científica sobre la evolución y detección temprana de este cáncer. Una técnica para analizar alteraciones bioquímicas específicas en un tumor es la espectroscopia micro-Raman. La tecnología micro-Raman permite identificar cambios bioquímicos en tejidos biológicos y se ha utilizado para analizar secciones de tejido mamario in vivo y ex vivo. En este artículo se presenta un estudio con espectroscopia Raman sobre las muestras de cáncer de mamas embebidas en parafina y fijadas con formalina (FFPP). Se seleccionaron zonas distintas en las muestras FFPP y se recogieron los espectros Raman. Las medidas mostraron superposición de los espectros debido al vidrio, hematoxilina, eosina, resina y tejido. Se midió la señal Raman de los componentes individuales, excepto de los espectros tisulares, y se realizó un análisis de componentes independiente ICA para obtener el espectro Raman del tejido. El resultado más significativo fue la extracción de los espectros Raman de los tejidos desde los espectros solapados.

## **Mathematical model for predicting probability of corrosion fault, indoor, and low voltage (SCC)**

## **Modelo matemático para predecir la probabilidad de falla por corrosión exterior, interior y bajo tensión (SCC)**

**H Aponte Betancur<sup>1</sup>, Y Pineda Triana<sup>1</sup> and E Vera López<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: hector.apontebetancur@uptc.edu.co

**Abstract.** In this work, we intend to generate a mathematical model to predict the probability of internal, external and undervoltage corrosion failure, as a function of utility time and service conditions (temperature, pressure, corrosion rate, medium conditions, etc.) Since they are the threats that depend on the time. These equations allow estimating a possible occurrence of a failure at time  $t$ , after a given inspection of a specific section of the duct. Also, allows predicting the maximum allowable service pressure over time according to ASME.

**Resumen.** En este trabajo se pretende generar un modelo matemático para predecir la probabilidad de falla por corrosión interior, exterior y bajo tensión, en función del tiempo de utilidad y condiciones de servicio, (temperaturas, presión, velocidad de corrosión, condiciones del medio, etc) dado que son las amenazas que depende del tiempo. Estas ecuaciones permiten estimar una posible ocurrencia de falla en un tiempo  $t$ , después de una inspección determinada de un tramo específico del ducto. también permite predecir la máxima presión permitida de servicio en el tiempo de acuerdo a ASME.

## Modeling and seismic verification of a historic building in masonry

## Modelado y verificación sísmica de un edificio histórico en mampostería

M Saba<sup>1</sup>, E Quiñones<sup>1</sup> and Meloni Daniel<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

<sup>2</sup> Università degli Studi di Cagliari, Italia

Email: manuelsaba1987@gmail.com

**Abstract.** In this project has been considered as case of study a historic building in masonry in Sardinia, Italy, modeling and carrying out static and seismic analysis of the structure; two software, with different approaches have been implemented with the purpose to compare results and evaluate the difference between them. As first simulator of the behavior of the structure has been chosen SismiCad12 which is a Finite Element Method software (FEM) that allows to model almost any type of 3D element and it is well adaptable to masonry structures, using finite elements to discretize the structure; in the other hand, a different and innovative approach of modelling called Frame Macro Elements (FME) have been applied using 3Muri software, specifically designed to assess linear, nonlinear and seismic behavior of masonry structures. Assuming the same hypothesis to build the 3D model of the structure for each software, the outcomes of static and dynamic analysis underline important difference between the two approaches. A possible interpretation of the results is offered.

**Resumen.** En este proyecto se ha considerado como caso de estudio un edificio histórico en mampostería en Cerdeña, Italia, modelando y realizando análisis estático y sísmico de la estructura; Dos softwares, con diferentes enfoques se han implementado con el fin de comparar los resultados y evaluar la diferencia entre ellos. Como primer simulador del comportamiento de la estructura se ha elegido SismiCad12 que es un software de Método de Elemento Finito (FEM) que permite modelar casi cualquier tipo de elemento 3D y es bien adaptable a las estructuras de mampostería, utilizando elementos finitos para discretizar la estructura; Por otro lado, se ha aplicado un enfoque diferente e innovador de modelado llamado Frame Macro Elements (FME) con el software 3Muri, diseñado específicamente para evaluar el comportamiento lineal, no lineal y sísmico de las estructuras de mampostería. Suponiendo las mismas hipótesis para construir el modelo 3D de la estructura para cada software, los resultados del análisis estático y dinámico subrayan la diferencia importante entre los dos enfoques. Se ofrece una posible interpretación de los resultados.

## Simulation of the capture forces in optical tweezers type

### Simulación de las fuerzas de captura en pinzas de tipo ópticas

D Paez Amaya<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia

Email: darbypaez@hotmail.com

**Abstract.** An Optical tweezers is a tool that allows capture and manipulates micrometric and sub-micrometric objects using a highly focused laser beam. From the moment in that is make the first capture observation with radiation pressure a new research field in multiple areas such as biology and microbiology is opened. In this paper, a graphical user interface in Matlab for the analysis of forces of light responsible of capture of dielectric sphere with an optical tweezers which uses a Laguerre-Gaussian mode type TEM01 or mode “do-nut” is constructed. In this interface is implemented an approximate method, the "Dipole Rayleigh" method that use equations of electrodynamics for to model the behavior of capture forces, allowing to obtain an approximation the behavior of the capture forces.

**Resumen.** Una pinza óptica es un instrumento que permite capturar y manipular objetos micrometricos usando para ello un haz laser altamente enfocado. Desde la primera observación de captura con presión de radiación, se abre un nuevo campo de investigación en múltiples areas, en donde se destacan la biología y microbiología. En este trabajo se construye una Interfaz Gráfica de Usuario, que facilita el análisis de las fuerzas de luz responsables de la captura de esferas dieléctricas con una pinza óptica que usa un modo de iluminación Laguerre-Gaussiano tipo TEM01 o llamado tambien modo “do-nut”. Además, se implementan los “Métodos aproximados”, en particular: el “Método Dipolar de Rayleigh”, el cual utiliza ecuaciones de la electrodinámica para modelar el comportamiento de las fuerzas de captura, permitiendo por medio de ecuaciones sencillas, obtener una aproximación del comportamiento de las fuerzas de captura.



## Simulation of the electromagnetic field in a cylindrical cavity for the heating of the plasma in an ECR source of multicarged ions

## Simulación del campo electromagnético en una cavidad cilíndrica para el calentamiento de un plasma en una fuente ECR de iones multicargados

A F Estupiñán López<sup>1</sup>, M T Murillo<sup>1</sup>, V Dougar-Zhabon<sup>1</sup> and E A Orozco Ospino<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: djlexes@gmail.com

**Abstract.** The ion sources are devices that produce atomic and molecular ions. These sources are used in spectrometers of optical emission, particle accelerators, ion implanters and ionic motors. In particular, Electron Cyclotron Resonance (ECRIS) Ion Sources are devices which microwave a magnetically confined plasma in a resonant cavity. In these types of systems the electric field configuration with antinodes coincident with the electronic cyclotron resonance surface of the source assisting the efficient heating of the plasma. These sources have become a tool for the production of multi-beam ionic beams used in particle accelerators for thermonuclear fusion experiments, ion implantation technologies and mass spectrometers, among others. In these systems, whose magnetostatic field has a complex configuration, it was experimentally found that electrons of relatively high energies are generated (of the order of hundreds of kilo-electron-volts). The mechanism of generation of these superheated electrons was unknown for decades until 2002 in which Dr. V. Dougar and co-investigators, based on experimental data and on Plasma simulations in minimal-B magnetic traps, hypothesized that The high energy electrons appear due to a mechanism of self-maintenance of the ECR conditions when they move on a resonance surface towards regions of greater intensity of the static magnetic field. This is done by creating concentric ellipsoidal surfaces within the cavity with a magnetic field that increases in all directions from the center to the walls of the plasma chamber. In one of these surfaces the rotation of Larmor of electrons is resonant with the injected microwaves and a very efficient heating of the plasma electrons is obtained. In this work the first results of the investigation of the heating of an ECR plasma in a source of ions, related to the simulations of the electromagnetic field in a cylindrical cavity mode TE<sub>111</sub> of 10 cm long and 4.54 cm of radius, 2.45 GHz frequency; As well as the magnetostatic field generated by the minimum-B magnetic trap used in said source. The electromagnetic field is calculated using the software "Three Dimensional Electromagnetic Particle In Cell code", (3DEMPIC), developed by members of the FITEK group of the Industrial University of Santander, which numerically solves Maxwell's equations using the method of Yee Of finite differences in the time domain - FDTD that uses a leap-frog scheme of second order centered differences to discretize the Maxwell equations). The magnetostatic field is calculated using the Biot-Savart law. To validate the results, the electric field pattern was compared with that obtained by known analytical studies, as well as by the verification of compliance with the Maxwell equations. For the temporal verification, the Fourier transform of the electric field amplitude was calculated, evidencing the correct oscillation frequency of said field. The results of the simulation, show the

correspondence between the resonance surface and the spatial structure of the electric field of microwaves to favor the heating of the plasma. In the next stage of the investigation the Plasma will be included in the cavity and its heating will be simulated automatically using the Particle-in-cell (PIC) method.

**Resumen.** Las fuentes de iones son dispositivos que producen iones atómicos y moleculares. Estas fuentes se utilizan en espectrómetros de emisión óptica, aceleradores de partículas, implantadores de iones y motores iónicos. En particular, las fuentes de iones de resonancia ciclotrónica electrónica (ECRIS por sus siglas en inglés) son dispositivos que calientan con microondas un plasma confinado magnéticamente en una cavidad resonante. En este tipo de sistemas la configuración de campo eléctrico con antinodos coincidentes con la superficie de resonancia ciclotrónica electrónica de la fuente favorece al calentamiento eficaz del plasma. Estas fuentes se han convertido en una herramienta para la producción de haces iónicos multicargados utilizados en aceleradores de partículas para experimentos de fusión termonuclear, tecnologías de implantación iónica y espectrómetros de masa, entre otros. En estos sistemas, cuyo campo magnetostático tiene una configuración compleja, se encontró experimentalmente que se generan electrones de energías relativamente altas (del orden de centenas de kilo-electron-voltios). El mecanismo de generación de estos electrones supercalientes fue desconocido por décadas hasta el año 2002 en el cual, el Dr. V. Dougar y coinvestigadores, basándose en datos experimentales y en simulaciones del Plasma en trampas magnéticas mínimo-B, plantearon la hipótesis de que los electrones de alta energía aparecen debido a un mecanismo de automantenimiento de las condiciones ECR cuando estos se mueven sobre una superficie de resonancia hacia regiones de mayor intensidad del campo magnético estático. Esto lo hace creando superficies elipsoidales concéntricas dentro de la cavidad con un campo magnético que aumenta en todas las direcciones desde el centro hasta las paredes de la cámara de plasma. En una de estas superficies la rotación de Larmor de electrones es resonante con las microondas inyectadas y se consigue un calentamiento muy eficiente de los electrones de plasma. En este trabajo se muestran los primeros resultados de la investigación del calentamiento de un plasma ECR en una fuente de iones, relacionados con las simulaciones del campo electromagnético en una cavidad cilíndrica modo TE<sub>111</sub> de 10 cm de largo y 4.54 cm de radio, excitada con una frecuencia de 2,45 GHz; así como el campo magnetostático generado por la trampa magnética mínimo-B utilizado en dicha fuente. El campo electromagnético es calculado utilizando el software “Three Dimensional ElectroMagnetic Particle In Cell code”, (3DEMPIC), desarrollado por miembros del grupo FITEK de la Universidad Industrial de Santander, el cual resuelve numéricamente las ecuaciones de Maxwell mediante el método de Yee (método de diferencias finitas en el dominio del tiempo – FDTD que utiliza un esquema leap-frog de diferencias centradas de segundo orden para discretizar las ecuaciones de Maxwell). Por su parte, el campo magnetostático es calculado utilizando la ley de Biot-Savart. Para validar los resultados se comparó dicho patrón de campo eléctrico con el obtenido mediante estudios analíticos conocidos, así como mediante la verificación del cumplimiento de las ecuaciones de Maxwell. Para la verificación temporal se calculó la transformada de Fourier de la amplitud del campo eléctrico, evidenciando la correcta frecuencia de oscilación de dicho campo. Los resultados de la simulación evidencian la correspondencia entre la superficie de resonancia y la estructura espacial del campo eléctrico de microondas para favorecer el calentamiento del plasma. En la siguiente etapa de la investigación se incluirá el Plasma en la cavidad y se simulará su calentamiento autoconsistentemente utilizando el método Particle-in-cell (PIC).

## Transport spin dependent in nanostructures: Current and geometry effect of quantum dots in presence of spin-orbit interaction

## Transport spin dependent in nanostructures: Current and geometry effect of quantum dots in presence of spin-orbit interaction

H Paredes<sup>1</sup>, S T Perez Merchancano<sup>2</sup> and C L Beltran Rios<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad del Cauca, Popayán, Colombia

Email: hparedes@uis.edu.co

**Abstract.** In this work, we study the quantum electron transport in a semiconductor nanostructure in the presence of quantum dots embedded in different geometries affected by their size, confinement in the nanostructure and by external electric fields. Here, we study the behavior of the current through the nanostructure considering the spin orbital coupling of the electrons, Rashba and Dresselhaus effect through the second quantization theory and the standard model of Green's functions. Our results show the behavior of the current in the quantum system as a function of the electric field, revealing resonant states for specific values of both the external field and the spin polarization. Likewise, the behavior of the current in the nanostructure changes substantially when the geometry, the size of the point and the confinement of the potential well are modified, taking into account the spin polarization of the electrons.

**Resumen.** En este trabajo, estudiamos el transporte cuántico de electrones en una nanoestructura semiconductor en presencia de puntos cuánticos embebidos de diferentes geometrías afectados por el tamaño de los mismos, el confinamiento en la nanoestructura y por campos eléctricos externos. Aquí, estudiamos el comportamiento de la corriente a través de la nanoestructura considerando el acoplamiento espín orbita de los electrones, efecto Rashba y Dresselhaus a través de la teoría de segunda cuantización y el modelo estándar de las funciones de Green. Nuestros resultados muestran, el comportamiento de la corriente en el sistema cuántico en función del campo eléctrico, revelando estados resonantes para valores específicos tanto del campo externo como de la polarización del espín. Así mismo, el comportamiento de la corriente en la nanoestructura cambia sustancialmente cuando se modifica la geometría, el tamaño del punto y el confinamiento del pozo de potencial, teniendo en cuenta la polarización de espín de los electrones.

# Unconventional vortex states due to anisotropy included in the nanoscale superconductors

## Estados de vórtice no convencionales debido a la anisotropía incluida en los superconductores a nanoescala

O J Gaona Cruz<sup>1</sup>, J R Beltrán Sánchez<sup>1</sup> and J D González Acosta<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia

Email: oscargaonacruz@gmail.com

**Abstract.** Using the anisotropic time-dependent Ginzburg-Landau theory, we study the vortex structures in two-dimensional mesoscopic superconductors with defects in the presence of a uniform magnetic field. The defects are included through varied  $T_c$  in different shapes into the sample which leads to unconventional on vortex states and magnetization. Several unconventional states are found, some comprising vortex clusters or exhibiting asymmetry. In samples with this kind of defect the vortex strings are formed owing to the interactions of vortices with Meissner currents and the weak-link defects. The thermodynamics parameters of the superconducting sample are determined as a function of the degree of the anisotropy generated in the defect, changing  $T_c$ .

**Resumen.** Utilizando la teoría dependiente del tiempo de Ginzburg-Landau anisotrópica, se estudian las estructuras de vórtice en superconductores mesoscópicos bidimensionales con defectos en presencia de un campo magnético uniforme. Los defectos se incluyen a través de variados  $T_c$  en diferentes formas en la muestra que conduce a no convencionales en los estados de vórtice y magnetización. Se encuentran varios estados no convencionales, algunos de los cuales comprenden grupos de vórtices o exhiben asimetría. En muestras con este tipo de defecto las cadenas de vórtice se forman debido a las interacciones de los vórtices con las corrientes de Meissner y los defectos del enlace débil. Los parámetros termodinámicos de la muestra superconductora se determinan en función del grado de anisotropía generada en el defecto, cambiando  $T_c$ .

# Vortex state in nano-structured systems superconductor- superconductor and superconductor-metal

## Estado de vórtice en sistemas nanoestructurados superconductor- superconductor y superconductor-metal

J D González Acosta<sup>1</sup>, J R Beltrán Sánchez<sup>1</sup> and J J Barba Ortega<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>3</sup> Foundation of Researches in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: jgonzaleza@unimagdalena.edu.co

**Abstract.** We obtain theoretically results in superconducting samples with considering structures superconductor-metal, superconductor-insulating and superconductor-superconductor. The time dependent Ginzburg-Landau equations (TDGL) are used to found the vortex array for different geometries and calculate the magnetization curves as a function of the external magnetic field. In such systems, the vortex configurations, as well as the critical fields, depend strongly of the pinning arrangement, geometry, thickness, anisotropy and upon the material in which the superconductor is submerged. TDGL equations are solved numerically by implementing computational codes to simulate the superconducting state and the thermodynamic properties of the proposed systems. In some cases, we observed that, depending on the material interface, there is an enhancement or depression of the surface superconductivity of the sample. The magnetization curves, superconducting electrons density and vortices number as a function of the magnetic field and the of Gennes extrapolation length  $b$ , are also studied.

**Resumen.** Obtenemos teóricamente resultados en muestras superconductoras con consideraciones de estructuras superconductor-metal, superconductor-aislante y superconductor-superconductor. Las ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo (TDGL) se utilizan para encontrar la matriz de vórtices para diferentes geometrías y calcular las curvas de magnetización en función del campo magnético externo. En tales sistemas, las conformaciones de vórtice, así como los campos críticos, dependen fuertemente de la disposición de fijación, geometría, espesor, anisotropía y sobre el material en el que está sumergido el superconductor. Las ecuaciones TDGL se resuelven numéricamente mediante la implementación de códigos computacionales para simular el estado superconductor y las propiedades termodinámicas de los sistemas propuestos. En algunos casos, observamos que, dependiendo de la interface material, hay una mejora o depresión de la superconductividad superficial de la muestra. También se estudian las curvas de magnetización, densidad de electrones superconductores y número de vórtices en función del campo magnético y la longitud de extrapolación de Gennes  $b$ .

## Web application implementation for information management scientific and technology of FORISTOM

## Implementación de una aplicación web para la gestión de la información científica y tecnológica de FORISTOM

L A Saavedra-Duarte<sup>1</sup>, P A Ruiz-Martinez<sup>1</sup>, A Angarita-Jerardino<sup>1</sup>, E D V-Niño<sup>2</sup>, H J Dulce-Moreno<sup>1,2</sup> and F H Vera Rivera<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: fredyhumbertovera@ufps.edu.co

**Abstract.** Information and Communication Technologies (TIC) are indispensable in the transfer of knowledge and Web tools, as part of TIC, are important for institutions that seek greater visibility of the products developed by their researchers. Therefore, a web application was implemented that allows the information management of the FORISTOM Foundation (Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials). The application shows a detailed description, not only of all its members but also of all the scientific production that they carry out, such as technological developments, research projects, articles, presentations, among others. This application Web may be implemented by other entities committed to scientific dissemination and the transfer of technology and knowledge.

**Resumen.** Las Tecnologías de Información y Comunicación (TIC) son imprescindibles en la transferencia de conocimiento y las herramientas Web, como parte de las TIC, son importantes para las instituciones que buscan una mayor visibilidad de los productos que desarrollan sus investigadores. Por tal motivo, se implementó una aplicación web que permite la gestión de la información de la Fundación FORISTOM (Foundation Of Researchers In Science and Technology Of Materials). La aplicación muestra una descripción detallada, no solo de todos sus integrantes sino también de toda la producción científica que los mismos realicen, como desarrollos tecnológicos, proyectos de investigación, artículos, ponencias, entre otros. Esta aplicación podrá ser implementada por otras entidades comprometidos con la divulgación científica y la transferencia de tecnología y conocimiento.

## Comparison between the analytical and numeric model used in the determination of the temperature field in a free convective vortex (FCV)

## Comparación entre el modelo analítico y numérico, utilizado en la determinación del campo de temperaturas en un vórtice libre convectivo (VLC)

P M Cano-Perdomo<sup>1</sup>, I C Rincon<sup>1</sup> and O Cuba-Guerra<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia

E-mail: isabel.rincon@unipamplona.edu.co

**Abstract.** The mathematical modeling of atmospheric vortex formations is a task of great importance due to the high danger for researchers and the cost of field investigations in the real places where the phenomenon occurs. This type of vortex formations is located in a privileged field of thermo-physical investigations and fluid mechanics, due to the fact that the convective free-type vortical formations are the closest analogues to the hurricane type vortices. It has been demonstrated that the study of its field of temperatures and the relation with its structure and dynamic formation constitutes a step forced by the recognition and explanation of its physical nature. The complex nature of these phenomena and the immense amount of unknowns related to the energy of vortical formation justify the investigation. In this work two elements of the modeling are conjugated: analytical modeling and numerical modeling on a single object of study: The Determination and comparison of the temperature field in a free convective vortex. In this work, the differential equation was obtained, that describes the Temperature Field for the Free Convective Vortex in the stationary state:

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \theta}{\partial R} + mR \frac{\partial \theta}{\partial R} - 2mz \frac{\partial \theta}{\partial Z} = 0$$

This equation is solved from a finite difference numerical model with which the vortex radius versus temperature ( $r(\theta)$ ) graphs and the vortex height versus temperature  $h(\theta)$  graphs are obtained, as well as the graph in 3D of  $r, h, \theta$ . The above equation continues to be solved until the general equation for temperature is obtained.

$$\theta_{(r,z)} = A_i \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \prod_{k=1}^n (-1)^k \frac{2m(k-1) + \lambda}{4k^2} \right] r^{2n} \right\} Z^{-\lambda/2m}$$

This expression represents the mathematical solution or the Analytical Model of the temperature field in a free convective vortex, with which we obtain the same vortex radius versus temperature ( $r(\theta)$ ) graph and the vortex height versus temperature  $h(\theta)$  graph, as well as the 3D graph of  $r, h, \theta$  for the comparison of the two models.

**Resumen.** La modelación matemática de las formaciones vorticiales atmosféricas constituye una tarea de suma importancia debido a la alta peligrosidad para los investigadores y el costo de las investigaciones de campo en los lugares reales donde se presenta el fenómeno. Este tipo de formaciones vorticiales, se sitúa en un campo privilegiado de las investigaciones termo-físicas y de la mecánica de fluidos, debido a que las formaciones vorticiales de tipo libre convectivo, son los análogos más cercanos a los vórtices de tipo huracanes. Ha quedado demostrado que el estudio de su campo de temperaturas y la relación con su estructura y formación dinámica, constituye un paso obligado para el reconocimiento y explicación de su naturaleza física. El carácter complejo de estos fenómenos y la inmensa cantidad de incógnitas relacionadas con la energética de la formación vorticial justifican la investigación. En este trabajo se conjugan dos elementos de la modelación: la modelación analítica y la modelación numérica sobre un único objeto de estudio: la determinación y comparación del campo de temperaturas en un vórtice libre convectivo (VLC). En este trabajo se obtuvo la ecuación diferencial que describe el Campo de Temperaturas para el Vórtice Libre Convectivo en el caso estacionario

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \theta}{\partial R} + mR \frac{\partial \theta}{\partial R} - 2mz \frac{\partial \theta}{\partial Z} = 0$$

Esta ecuación se resuelve a partir de un Modelo Numérico de diferencias finitas con el cual se obtienen los gráficos de radio del vórtice versus temperatura ( $r(\theta)$ ) y el gráfico de altura del vórtice versus temperatura  $h(\theta)$ , así como el gráfico en 3D de  $r, h, \theta$ . La ecuación anterior se sigue resolviendo hasta que se obtiene la ecuación general para la temperatura.

$$\theta_{(r,z)} = A_i \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \prod_{k=1}^n (-1)^k \frac{2m(k-1) + \lambda}{4k^2} \right] r^{2n} \right\} z^{-\lambda/2m}$$

Esta expresión representa la solución matemática o el Modelo Analítico del Campo de Temperaturas del VLC, con el cual obtenemos los mismos gráficos de radio del vórtice versus temperatura ( $r(\theta)$ ) y el gráfico de altura del vórtice versus temperatura  $h(\theta)$ , así como el gráfico en 3D de  $r, h, \theta$  para la comparación de los dos modelos.



# Effect of conduction band nonparabolicity on Aharonov-Bohm oscillations in N-type InAs/GaAs quantum ring

## Efecto de la no-parabolicidad de la banda de conducción en las oscilaciones de Aharonov-Bohm en el anillo cuántico InAs/GaAs tipo N

L F García<sup>1</sup>, I D Mikhailov<sup>1</sup> and H Paredes<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: lfragar@gmail.com

**Abstract.** We study the effect of nonparabolicity of the conduction band on the energy spectrum of the off-axis donors in InAs crater-like quantum rings in framework of the Kane Hamiltonian. By using a simple numerical procedure we find the low-lying energies dependencies on the radius, height and width of the ring and on the distance of the donor location from the axis. The comparison of our results with those obtained in one-band effective mass approximation reveals an essential influence of the non-parabolicity of the conduction band on the off-axis energy spectra in InAs/GaAs quantum rings. In addition, we analyze the effect of the external magnetic field applied along the symmetry axis on the Aharonov-Bohm oscillations of lower energy levels.

**Resumen.** Se estudia el efecto de la no-parabolicidad de la banda de conducción en el espectro de energía de los donadores fuera del eje de anillos cuánticos en forma de crater de InAs en el marco de la Hamiltoniana de Kane. Usando un procedimiento numérico simple encontramos las dependencias de las energías más bajas dependientes del radio, la altura y el ancho del anillo y la distancia de la ubicación del donante desde el eje. La comparación de nuestros resultados con los obtenidos con la aproximación de masa efectiva de una banda revela una influencia esencial de la no parabolicidad de la banda de conducción en el espectro de energía fuera del eje en los anillos cuánticos InAs/GaAs. Además, analizamos el efecto del campo magnético externo aplicado a lo largo del eje de simetría sobre las oscilaciones de Aharonov-Bohm de niveles de energía más bajo.

**New Materials – NM**

**Nuevos Materiales – NM**

## Adsorption and lateral diffusion of C atoms on wurtzite (0 0 0 1)-AlN surface

## Adsorción y difusión lateral de átomos de C sobre la superficie wurtzita (0 0 0 1)-AlN

J F Murillo García<sup>1</sup>, M G Moreno-Armenta<sup>2</sup>, J A Rodríguez Martínez<sup>3</sup>, N Takeuchi Tan<sup>4</sup>  
and C Ortega López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>4</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Ensenada, México

Email: g.a.llorente@gmail.com

**Abstract.** Adsorption and lateral diffusion of carbon atoms was studied. Possible sites to adsorb C atoms on wurtzite (0 0 0 1)AlN-Al terminate on the 2x2 surface were analyzed: T1 (on top of Al), T4 (on top of N), H3 (center of an equilateral triangle formed by three atoms of Al), Bridge1 (site between two adjacent atoms), Bridge2 (site between two non adjacent atoms). Computational calculations are reported in the context of Density Functional Theory (DFT) shows that the best site to put a Carbon on wurtzite AlN(0 0 0 1) surface is on H3 and the next point is T4 which is 0.24eV higher than H3. The worst point is T1. The adsorption in H3 or on T4 is very interesting because the structure exhibits a magnetic moment of 1.00 $\mu$ B. Electronic properties as electron energy bands and density of states are shown. Calculations were performed at the DGCTIC-UNAM under projects SC16-1-IR-57. MGMA thanks the DGAPA-UNAM project IN102714-3.

**Resumen.** Se estudiaron la adsorción y difusión lateral de átomos de carbono. Se analizaron posibles sitios para los adsorbatos de C sobre la superficie 2x2 del (0 0 0 1)AlN terminada en Al: T1 (sobre Al), T4 (sobre N), H3 (centro de un triángulo equilátero formado por tres átomos de Al), Puente1 (sitio entre dos átomos adyacentes), Puente2 (sitio entre dos átomos no adyacentes). Los cálculos computacionales que son reportados en el marco de la Teoría de la Funcional Densidad (DFT) muestran que el mejor sitio para ubicar al Carbono sobre la superficie wurtzita AlN(0 0 0 1) es H3 y el sitio próximo es T4 el cual está 0.24eV por encima de H3. El peor sitio es T1. La adsorción en H3 o en T4 es muy interesante porque la estructura exhibe un momento magnético de 1.00  $\mu$ B. Se muestran las propiedades electrónicas como la energía de bandas electrónica y la densidad de estados. Los cálculos se realizaron gracias a DGCTIC-UNAM en el proyecto SC16-1-IR-57 y MGMA en DGAPA-UNAM IN102714-3.

# Adsorption of chromium on two-dimensional hexagonal ZnO surface

## Adsorción de cromo sobre la superficie ZnO hexagonal dos-dimensional

G A Berrio Cordero<sup>1</sup>, J F Murillo Garcia<sup>1</sup> and C Ortega López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

Email: gberrioc@gmail.com

**Abstract.** In this work, we made a study of the adsorption of one Cr atom on a hexagonal two-dimensional ZnO monolayer, in the hexagonal 4x4 geometry. The calculations are carry out, using the DFT (Density Functional Theory) within the generalized Perdew-Burke-Ernzerhof gradient approximation (GGA-PBE) with ultrasoft pseudopotentials and a plane wave base as implemented in the Quantum-ESPRESSO package. The monolayer is modeled using the periodic Slab scheme. To study the most favorable energetically adsorption model is considered the T1 sites (at the top of Zn atom), T\*1 (at the top of O atom), H6 (right at the center of the hexagon), Br1 (at the middle point of the distance between Zn-Zn line, in the Zn-O-Zn angle) and Br2 (at the middle point of the distance between O-O line, in the O-Zn-O angle). We found that the most favorable energetically corresponds to Cr-T1 model or Cr ad-atom model localized at the T\*1 site. Finally, is analyzed in detail the density of states of the ZnO monolayer with and without Cr ad-atom.

**Resumen.** En este trabajo, se hace un estudio de la adsorción de un átomo de Cr sobre una monocapa de ZnO hexagonal bidimensional, en la geometría hexagonal 4x4. Los cálculos se realizan, usando la teoría de la funcional de la densidad (DFT: Density Functional Theory) dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) con seudopotenciales ultrasuaves y una base de ondas planas como se implementa en el paquete Quantum-ESPRESSO. La monocapa se modela usando el esquema de Slab periódico. Para estudiar el modelo de adsorción energéticamente más favorable se consideran los sitios T1 (justo encima de un átomo de Zinc), T\*1 (justo encima de un átomo de oxígeno), H6 (Justo en el centro del hexágono), Br1 (punto medio de la distancia que une el segmento Zn-Zn, en el ángulo Zn-O-Zn) y Br2 (punto medio de la distancia que une el segmento O-O, en el ángulo O-Zn-O). Se encuentra que la estructura energéticamente más favorable corresponde al modelo Cr-T1 o modelo ad-átomo de cromo localizado en el sitio T1. Finalmente, se analiza en detalle la densidad de estados de la monocapa de ZnO con y sin ad-átomo de cromo.

# A theoretical study of half-metallic ferromagnetic behaviour of C-doped zincblende-AlN

## Un estudio teórico del comportamiento semimetálico y ferromagnético del AlN-zinblenda dopado con C

M J Espitia Rico<sup>1</sup>, J Diaz Forero<sup>1</sup> and C Ortega López<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

Email: mespitiar@udistrital.edu.co

**Abstract.** In this work based on spin polarized density functional theory structural, electronic and magnetic properties of carbon doped zincblende AlN are investigated. The calculations were executed by means pseudopotential method employed exactly as implemented in the Quantum Espresso code. For 0.625% C-doped AlN is found ferromagnetic and half-metallic behaviour because of the fact that the majority spins are metallic and the minority spins are semiconducting. Per super cell has a net magnetic moment of  $1\mu\beta$ . The main contribution to the magnetic moment comes from the orbitals 2p-C and 2p-Al. Our results suggest that the C-doped AlN has potential applications in semiconductor spintronic devices and as spin injectors.

**Resumen.** En este trabajo basados en la teoría del funcional de la densidad se estudiaron las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas del AlN en la estructura zinblenda dopado con Carbono los cálculos fueron realizados usando el método del pseudopotencial tal y como está implementado en código Quantum Espresso. Para una concentración de 6,25% de C en el AlN encontramos que el compuesto posee un comportamiento ferromagnético y semimetálico debido a que los espines mayoritarios son metálicos y los espines minoritarios son semiconductores. El compuesto posee un momento magnético total de  $1\mu\beta$  por súper celda. La principal contribución al momento magnético proviene de los orbitales 2p-C y 2p-Al. Los resultados obtenidos sugieren que el AlN dopado con átomos de C posee potenciales aplicaciones en dispositivos semiconductores de espintrónica y como inyectores de espín.

## Blast furnace dust and phosphoric slag, new materials for using in road engineering

## Polvillo de alto horno y escoria fosfórica, nuevos materiales para su uso en ingeniería vial

R Ochoa Díaz<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: ricardo.ochoa@uptc.edu.co

**Abstract.** The blast furnace dust and the phosphoric slag are steel production byproducts at steel mills. The dust comes from the blast furnace where the iron ore becomes cast iron, this material is derived from the decantation of the particulate material present in the gases resulting from iron ore combustion. The phosphoric slag comes from the converters where cast iron becomes steel. Taking into account the above, this document presents the feasibility study of using these materials in asphalt concrete manufacturing for highway construction. This way, first of all, the blast and slag origin, properties, and physical and chemical characteristics are described. Then, the mixture is formulated and evaluated through the RAMCODES design method to determine its mechanical parameters and compare them with those of a traditional asphalt concrete. Finally, the behavior of the mixture subjected to dynamic loads is evaluated by means of the resilient modules determined by the NAT team (Nottingham Asphalt Tester). As a result, it was determined the convenience of its use in asphalt concrete for highway construction under some specific conditions.

**Resumen.** El polvillo de alto horno y la escoria fosfórica son subproductos de la fabricación de acero en las siderúrgicas integrales. El polvillo proviene del alto horno en donde se convierte el mineral de hierro en arrabio, este material es producto de la decantación del material particulado presente en los gases derivados de la combustión del mineral de hierro. La escoria fosfórica proviene de los convertidores en donde se convierte el arrabio en acero. Teniendo en cuenta lo anterior, este documento presenta el estudio de factibilidad de usar estos materiales en la fabricación de mezclas asfálticas para la construcción de carreteras. De este modo, inicialmente se describe la procedencia, propiedades y características químicas y físicas del polvillo y la escoria. Seguidamente, se formula y evalúa la mezcla, mediante el método de diseño RAMCODES, para determinar sus parámetros mecánicos y compararlos con los de una mezcla asfáltica tradicional. Por último, se evalúa el comportamiento de la mezcla sometida a cargas dinámicas por medio de los módulos resilientes determinados con el equipo NAT (Nottingham Asphalt Tester). Como resultado, se determinó la conveniencia de su uso en mezclas asfálticas para la construcción de carreteras bajo algunas condiciones específicas.

## Characterization and obtainment of concentrates in phosphoric rocks of Turmequé (Boyacá)

## Caracterización y obtención de concentrados en rocas fosfóricas de Turmequé (Boyacá)

S Quijano<sup>1</sup>, Lozano Luis<sup>1</sup> and Y Pineda Triana<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: sonia.quijano@uptc.edu.co

**Abstract.** The present work centers in the use and exploitation of phosphoric–acidulated rock as phosphorus source for its application in acid grounds and short term cultures, besides its environmental and economic impact when a 30% of sulfuric acid is replaced with ammonium thiosulfate in specific concentrations. This procedure focuses on two different phosphoric rock’s recollection sites from Boyacá (Turmeque and Sogamoso), using and randomized design with three repetitions initially, the samples were molded and sieved with a 100 US standardized net, homogenizing them and improving the phosphoric solubility into the ground. The kinetic study of this reaction during the incubation time, took as variable the available phosphorus pentoxide percentage in the course of time and the pH was adjusted with commercial ammonia later. The chemical composition results, before and after the simple DRX mediated superphosphate obtaining process, confirms that the used protocol increases up to 3% the availability of phosphorus in the collected sample and in the net amount of sulfur as well. These values allow us to establish the efficacy of this process, when compared to commercial products available on the market in the improvement of cultures as corn and wheat.

**Resumen.** El presente trabajo, se focaliza en el uso y aprovechamiento de la roca fosfórica acidulada como fuente de fósforo para aplicación en suelos ácidos y cultivos de ciclo corto, además de tener un impacto ambiental y económico al sustituir un 30% de ácido sulfúrico (AS) por tiosulfato de amonio (TSA) en concentraciones específicas. El procedimiento se fundamentó en la recolección de tres fuentes de roca fosfórica del departamento de Boyacá (municipios de Turmequé y Sogamoso), utilizando un diseño aleatorizado con tres repeticiones. Inicialmente, las muestras fueron molturadas y tamizadas a malla 100 US estándar, homogenizándolas y mejorando el proceso de solubilidad del fósforo en el suelo. El estudio cinético de esta reacción durante el periodo de incubación, tomó como variable el porcentaje de pentóxido de fósforo disponible en el transcurso del tiempo y posteriormente se ajustó el pH con amoniaco comercial. Los resultados de composición química, antes y después del proceso de obtención de superfosfato simple, con DRX, confirma que el protocolo utilizado incrementa hasta en un 3% el valor de fósforo disponible en la muestra al igual que en el contenido neto de azufre. Dichos valores, permiten establecer la efectividad del proceso, comparados con los productos comerciales disponibles como agroinsumos en el mejoramiento de cultivos como maíz y trigo.

## Combustion in solution synthesis of Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> doped with Ag for photocatalytic and photodynamic applications in the visible

## Síntesis por combustión en solución de Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> dopado con Ag para aplicaciones fotocatalíticas y fotodinámicas en el visible

S Restrepo<sup>1</sup>, A A Lopera Sepúlveda<sup>1</sup>, C García<sup>1</sup>, M A Zaguete<sup>2</sup>, A M Arenas Velasquez<sup>2</sup>, M A Graminha<sup>2</sup> and A Chavarriaga<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

<sup>2</sup> Universidade Estadual Paulista, Sao Paulo, Brazil

<sup>3</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: sebretpovel@unal.edu.co

**Abstract.** Zinc titanate (Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub>) is an inverse spinel interesting for its electrical and optical properties. It is also recently classified as a photocatalytic compound with potential applications in the visible spectrum. A photocatalytic compound is one that, when irradiated with the appropriate wavelength, produces an electronic excitation that allows the production of Reactive Oxygen Species (ROS) in the presence of oxygen and/or molecular water. ROS species can interact with different molecular structures such as -N=N- in the degradation of dyes or produce a photodynamic response by inducing peroxidation of lipid membranes in biological systems for potential applications in antimicrobial, anticancer and even antiparasite systems such as the case of Leishmaniasis. In this type of applications, the systems must be activated in the visible spectrum and avoid wavelengths like the ultraviolet that can cause damages to the health. On the other hand, the antimicrobial and antileishmania potential of Ag nanoparticles and their improvement in catalytic performance when used as a dopant or sensitizer is well known. The main goal of this work was to synthesize Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> doped with Ag through the combustion in solution route and to evaluate its photocatalytic response in the visible spectrum by means of the degradation of methylene blue and to verify its photodynamic response in biological media through the Leishmanicide response in promastigote forms of Leishmania amazonenses. X-ray diffraction showed the formation of spinel and the Ag presence in the synthesized material. Field emission electron microscopy showed the formation of aggregates formed by grains less than 100nm. Fluorescence spectrophotometry confirmed the formation of ROS species and the formation of hydroxyl radicals. The compounds showed an effective degradation of methylene blue in approximately one hour and showed the antileishmania effect at a concentration of 250±30µg/mL.

**Resumen.** El titanato de cinc (Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub>) es una espinela inversa interesante por sus propiedades eléctricas y ópticas. Recientemente se clasifica también como compuesto fotocatalítico con potenciales aplicaciones en el espectro visible. Un compuesto fotocatalítico es aquel que al ser irradiado con la longitud de onda adecuada, produce una excitación electrónica que permite la producción de especies reactivas de oxígeno (ROS) en presencia de oxígeno y/o agua molecular. Las especies ROS pueden interaccionar con diferentes estructuras moleculares como por



ejemplo -N=N- en la degradación de colorantes o producir una respuesta fotodinámica al inducir peroxidación de membranas lipídicas en sistemas biológicos para aplicaciones potenciales en sistemas antimicrobiales, anticancerígenos e incluso antiparasitarios como es el caso particular de la Leishmaniasis. En este tipo de aplicaciones se busca que los sistemas puedan ser activados en el espectro visible y evitar longitudes de onda como la ultra violeta que pueden causar daños a la salud. Por otra parte, es bien conocido el potencial antimicrobial y antileishmania de las nanopartículas de Ag y su mejoramiento en el rendimiento catalítico cuando es usado como dopante o sensibilizador. El principal objetivo de este trabajo fue sintetizar Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> dopado con Ag mediante la ruta de combustión en solución y evaluar su respuesta fotocatalítica en el visible mediante la degradación de azul de metileno y verificar su respuesta fotodinámica en medios biológicos mediante la respuesta Lesihmanicida en formas promastigotas de Leishmania amazonenses. Mediante Difracción de rayos X se comprobó la formación de la espinela y la presencia de Ag en el material sintetizado. La microscopia electrónica de emisión de campo mostró la formación de agregados conformados por granos inferiores a 100nm. Mediante espectrofotometría de fluorescencia se comprobó la formación de especies ROS y la formación de radical hidroxilo. Los compuestos mostraron una efectiva degradación de azul de metileno en aproximadamente una hora y presentaron efecto antileishmania para una concentración de 250±30µg/mL.

## Development of a low cost adsorbent material for the removal of dyes present in wastewater

## Desarrollo de un material adsorbente de bajo costo para la remoción de colorantes presentes en aguas residuales

S Giraldo Ardila<sup>1</sup>, A P Ramirez Muñoz<sup>1</sup>, E Flórez Yepes<sup>1</sup>, M Ulloa<sup>1</sup> and N Acelas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Medellín, Medellín, Colombia

Email: stepha930925@hotmail.com

**Abstract.** Continuous discharge of dyes from different industrial sectors have led to the deterioration of aquatic ecosystems by micro-toxicity. Because of this, research on new and efficient procedures for dye removal from wastewater is currently underway. One of the most promising, cost-effective and easy to use techniques to use in waste water treatment plants is the adsorption. However, the challenge is to find selective, renewable and economical adsorbent materials. Agroindustrial residues become in a suitable source to obtain active materials for dyes adsorption. Teak is a wood with high durability and strength, and therefore it is used in the industry for different applications. The high amount of wastes (teak sawdust) generate disposal environmental problems and therefore it is important to find some type of use for this residue. In this study, the residue of teak (sawdust) produced in the wood industries was chemically modified to obtain an active adsorbent material to remove contaminants. For two industrial dyes with different chemical nature, removal percentages of 98% and 50% were found. The active adsorbent material was characterized by different analytical techniques such as BET, SEM-EDS, FRX, FTIR and TGA.

**Resumen.** Los continuos vertimientos de colorantes, provenientes de diferentes sectores industriales ha provocado el deterioro de los ecosistemas acuáticos por micro-toxicidad. Debido a esto, actualmente la investigación relacionada con nuevos procedimientos eficientes en la remoción de colorantes desde aguas residuales es cada vez mayor. Una de las técnicas más promisorias, costo-efectiva y de fácil operación para ser utilizada en plantas de tratamiento de aguas residuales, es la adsorción, y el gran desafío es encontrar adsorbentes selectivos, renovables y económicos. Los residuos agroindustriales se convierten en una fuente adecuada para la obtención de materiales activos hacia la adsorción de colorantes. La teca es una madera con alta durabilidad y resistencia por lo que es utilizada en la industria para diferentes aplicaciones. La alta cantidad de residuos (aserrín de teca) producidos generan problemas medioambientales de disposición y por tanto, es importante buscar algún tipo de aprovechamiento. En el presente estudio, se modificaron químicamente los residuos generados en la industria maderera (aserrín de teca) y se obtuvo un material adsorbente activo hacia la remoción de contaminantes. Para dos colorantes industriales con diferente naturaleza química, se encontraron porcentajes de remoción del 98% y 50%. El material adsorbente activo se caracterizó por diferentes técnicas de análisis tales como, BET, SEM-EDS, FRX, FTIR y TGA.

## Development of new textile materials from Colombian natural fibers

### Desarrollo de nuevos materiales textiles a partir de fibras naturales Colombianas

M C Amaya Vergara<sup>1</sup>, M C Restrepo R<sup>1</sup>, J A Manrique<sup>1</sup>, P F Gañan R<sup>1</sup>, L M Velez A<sup>1</sup>, R Zuluaga G<sup>1</sup> and C I Castro H<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia

Email: mariac.amaya@upb.edu.co

**Abstract.** The most important fiber for clothing consumption in Colombia is cotton. However, approximately 50% of it has to be imported since the country is not able to self-supply its demand. At the same time, Colombia is well known for its great biodiversity and about 114 different natural fibers are actually being used by the artisan communities for their product development. One of these fibers is Fique. In addition to its use in crafts production, Fique is also processed in the industry for its transformation into cords and sacks for agroindustrial product packaging due to its excellent mechanical behavior. However, because of its rough touch, coarse aspect, and high linear density, there hasn't been any developments around the fiber to diversify its uses and applications for the production of high-added value textiles. The chemical composition and morphological analysis determined that high contents of lignin and hemicellulose in the fiber, do not allow the isolation of the constituted fibers to obtain cotton-like properties. For this reason, a chemical "customization" process was evaluated in which these substances were removed without affecting the fibrillar structure of the fiber. Then, the "cottoned" fibers were used in the production of high count yarns for their subsequent transformation into fabrics for clothing applications. The fibers were blended with cotton for an intimately blended yarn development in a traditional ring spinning process and then, woven in a conventional loom. Fabric characterization determines the viability of its use in different applications for the garment industry. In the future, these results and the technological evolution around the fiber could positively impact the almost 80.000 poor farmer families that get their incomes from Fique and can contribute sustainably to the development of the natural fiber industry in Colombia.

**Resumen.** En Colombia, la fibra que más se consume para la producción de prendas de vestir es el algodón. Sin embargo, aproximadamente el 50% de este debe ser importado ya que el país no es capaz de autoabastecer su demanda. A su vez, Colombia es reconocido por su gran biodiversidad con alrededor de 114 diferentes fibras naturales, que son utilizadas por las comunidades artesanales para la elaboración de sus productos. Una de estas fibras es el Fique, que además de sus usos en la artesanía, también es procesado de manera industrial para su transformación en cuerdas y sacos para la exportación de productos agroindustriales debido a las excelentes propiedades mecánicas que posee. Sin embargo, por su tacto áspero, aspecto burdo y poca finura no ha habido ningún desarrollo para diversificar sus usos o aplicaciones en la producción de textiles con mayor valor agregado. El análisis de la morfología de la fibra y su composición química determinaron que el alto contenido de sustancias como la lignina y la

hemicelulosa, las cuales son responsables de impedir la separación de las fibrillas que constituyen la fibra, lo que le permitiría obtener propiedades similares a las del algodón. Es por esto, que se evaluó un proceso de "cottonizado" químico alcalino, en el cual se removieron estas sustancias sin afectar la estructura fibrilar, lo que permitió utilizar estas fibrillas en la producción de hilados finos para su posterior transformación en bases textiles para aplicaciones en vestuario. Estas fibras "cottonizadas" fueron mezcladas con algodón en un proceso de hilatura tradicional por anillo y posteriormente tejidas en telares convencionales para tejido plano. Las bases textiles fueron caracterizadas y se determinó la viabilidad de estas para ser utilizada en la confección de diferentes tipos de prendas de vestir. En consecuencia, los resultados de esta investigación y la evolución tecnológica en torno a la fibra podrían impactar de manera positiva a las casi 80.000 familias campesinas pobres que obtienen sus ingresos del cultivo de Fique y puede contribuir de manera sostenible al desarrollo de la industria de las fibras naturales en Colombia.

## Development of refractories by Freeze Casting processing

## Desarrollo de refractarios por el proceso de Freeze Casting

S Gil Duran<sup>1</sup>, C M Mesa Toro<sup>2</sup>, G Gallego<sup>2</sup> and E A Ossa Henao<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad EAFIT, Medellín, Colombia

<sup>2</sup> Empresa de Refractarios Colombianos S.A.S., Colombia

Email: sgildura@eafit.edu.co

**Abstract.** In processes involving high temperatures, energy consumption with the maximum efficiency has led to the development of refractory materials that are often classified by their level of porosity. Large volume fractions of pores are used where good thermal insulation at high temperatures is required; whereas, low volume fraction of pores is used where good mechanical and chemical corrosion resistance is needed. Freeze casting processing allows obtaining materials with controlled structures. This characteristic of the process is desired to create new high performance materials for thermal insulation that combine the properties required by specific applications. In this study, water based refractory slurry suspensions were prepared by varying the volume fraction of ceramic particles (30, 40 and 50% weighted), and then processed by the freeze casting process using unidirectional cooling. Thermal and mechanical characterization of the sintered samples included: density and porosity (ASTM D-20), thermal conductivity and creep test. Results showed that the freeze casting process allows the development of materials with controlled gradient structures from zones with low porosity and others with high porosity. Furthermore, suspensions prepared with low volume fractions of ceramic particles created samples with a longer zone having low porosity. On the other hand, higher volume fractions decreased the length of the zone with low porosity. As a result, the freeze casting process allows tuning the thermal and mechanical properties of the sintered material by varying the volume fraction of ceramic particles within the slurry suspensions.

**Resumen.** En los procesos que implican altas temperaturas, el consumo de energía con la máxima eficiencia ha llevado al desarrollo de materiales refractarios que a menudo se clasifican por su nivel de porosidad. Altas porosidades se requieren para un buen aislamiento térmico a altas temperaturas; Mientras que bajas cuando se necesita una buena resistencia a la corrosión mecánica y química. El proceso de Freeze casting permite obtener materiales con porosidad controladas. Esta característica del proceso se desea para crear nuevos materiales de alto rendimiento para el aislamiento térmico que combinan las propiedades requeridas por aplicaciones específicas. En este estudio, se prepararon suspensiones coloidales de una pasta refractaria a base de agua, se varió la fracción volumétrica de partículas (30, 40 y 50% en peso), y luego se procesaron mediante el proceso de Freeze casting usando enfriamiento unidireccional. La caracterización térmica y mecánica de las muestras sinterizadas analizadas son: densidad y porosidad (ASTM D-20), conductividad térmica y ensayo de fluencia (creep). Los resultados mostraron que el proceso de Freeze casting permite el desarrollo de materiales con gradiente de porosidad, desde zonas con baja y otras con alta porosidad. Además, las suspensiones preparadas con fracciones bajas de partículas resultaron en muestras con una zona más larga que tenía baja porosidad. Por otra parte, las fracciones altas de partículas disminuyeron la longitud de la zona

con baja porosidad. Como resultado, el proceso de Freeze casting permite modificar las propiedades térmicas y mecánicas del material variando la fracción de partículas dentro de la suspensión.

## Effect of the surface modification of the fibers in the physical and mechanical properties of panels made with materials of vegetal origin

## Efecto de la modificación de la superficie de las fibras en las propiedades físicas y mecánicas de paneles elaborados con materiales de origen vegetal

M Sánchez<sup>1</sup>, W A Aperador Chaparro<sup>1</sup> and G Capote<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: martha.sanchez@unimilitar.edu.co

**Abstract.** In this work, the analysis of the effect of the process of delignification of fibers of the bamboo of the species *Guadua Angustifolia* Kunth on the physical and mechanical properties of panels made with fibers randomly distributed in a resin of vegetal origin is presented. The modification of the fiber surfaces was done by means of a chemical and a physical method. The chemical method consisted in the application of an alkaline treatment varying concentrations of sodium hydroxide. The physical method consisted of a treatment with cold plasma of methane. For the elaboration of the panels the method of manual molding and compaction by pressing was used. The physical properties of the composites were evaluated by the determination of their density, effective absorption, and percentage of swelling. In order to evaluate the mechanical behavior, tests of tensile strength, compression, and static bending were performed. Panels made with fibers treated using cold plasma of methane presented a significant reduction in the absorptive capacity, a greater dimensional stability, and a better mechanical performance.

**Resumen.** En este trabajo es presentado el análisis del efecto del proceso de deslignificación de fibras de bambú de la especie *Guadua Angustifolia* Kunth en las propiedades físicas y mecánicas de paneles elaborados con fibras aleatoriamente distribuidas en una resina de origen vegetal. La modificación de la superficie de las fibras fue realizada por medio de un método químico y un método físico. El método químico consistió en la aplicación de un tratamiento alcalino con concentraciones variables de hidróxido de sodio. El método físico consistió en realizar un tratamiento con plasma frío de metano. Para la elaboración de los paneles fue utilizado el método de moldeo manual y compactación por prensado. La evaluación de las propiedades físicas del compuesto se centró en la determinación de la densidad, absorción efectiva y el porcentaje de hinchamiento. Para evaluar el comportamiento mecánico fueron realizados ensayos de resistencia a tensión, compresión y flexión estática. Paneles elaborados con fibras tratadas con plasma frío de metano presentaron una reducción significativa en la capacidad de absorción, una mayor estabilidad dimensional y un mejor desempeño mecánico.

## Elaboration and characterization of porous ceramics based on kaolin, diatomite and calcium carbonate from Chivatá, Boyacá

## Elaboracion y caracterización de cerámicas porosas a base de caolin, diatomita y carbonato de calcio de Chivatá, Boyacá

J P Leal Quintero<sup>1</sup>, E Vera López<sup>1</sup>, Y Pineda Triana<sup>1</sup>, E J Espinosa Cardenal<sup>1</sup> and Peña Rodríguez Gabriel<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

Email: jessie.jk84@gmail.com

**Abstract.** At present, porous ceramics are being widely used in technological applications in filtration processes, water and oil microfiltration, as catalytic supports, such as thermal and acoustic insulation, in architecture, agriculture, in the biomedical area, among others. In order to give added value to the minerals of the Boyacá region, a slurry of kaolins, diatom and calcium carbonate powders (60%, 30% and 10%, respectively) of Chivatá (Boyacá) was prepared by the replica method using different types of polyurethane (PU) foams with densities between 15 and 30kg/m<sup>3</sup>, generating different porosities. Subsequently, a drying process was carried out at room temperature for about 24 hours followed by forced circulation drying at 110±5°C and finally sintered at 1200°C for about 5 hours in Electric muffle Terrigeno. It was characterized the chemical composition of the raw materials, slurry and porous ceramics by X-ray diffraction (XRD), X-ray Fluorescence (FRX) and X-ray energy dispersion spectrometry (EDS). The flexural strength of porous ceramics was analyzed using ISO 10545-4 and the morphology of the samples was analyzed by SEM. The loss of mass, linear contraction of the material, apparent density and percentage of water absorption of the ceramics, were determined under ISO 10545-3. According to the established proportions of the raw materials, a homogeneous chemical composition of the suspension was obtained with a high concentration of illite, quartz, calcite and a kaolinite low content, as well as high Si, Al and Ca contents with values of 50.3, 23.2 and 10.4% respectively. Within the morphological analysis to the foams a homogeneous honeycomb distribution with interconnected porosities and pore sizes between 0.7mm and 0.81mm is observed. The SEM analysis of the suspension showed the presence of fossilized algae frustulas of the type: Pinnularia cf major together with some fragments of Aulacoseira granulata mixed in homogeneous form with calcite crystals agglomerated with kaolin plates. For porous ceramics, the pore sizes vary between 948.8nm and 55.67µm, presenting pores of the order nanometric, micrometric and macrometric. It can be seen that the lower bulk density increases the water retention capacity in the ceramic matrix. Likewise, the percentages of mass loss vary from 11.66 to 17.77%, the linear contraction of the material varies from 5.97% to 27%, and the percentage of water absorption oscillate between 31.47 and 39.68%. It is evidenced that the flexural strength varies from 13.3MPa to 4.46MPa and the breaking force from 3547.25N to 1190N. It is concluded that this chemical composition and the method of forming used, is optimal to develop porous ceramics directed to various processes of Filtration and microfiltration of water and oils.



**Resumen.** En la actualidad, las cerámicas porosas están siendo ampliamente utilizadas en aplicaciones tecnológicas en procesos de filtración, microfiltración de aguas y aceites, como soportes catalíticos, como aislamiento térmico y acústico, en arquitectura, agricultura, en el área biomédica, entre otros. Con el fin, de dar un valor agregado a los minerales de la región de Boyacá, se preparó una barbotina con polvos de caolines, diatomeas y carbonato de calcio (60%, 30% y 10% respectivamente) de Chivatá (Boyacá) mediante el método de réplica utilizando diferentes tipos de espumas de poliuretano (PU) con densidades entre 15 y 30Kg/m<sup>3</sup>, generando diversas porosidades. Posteriormente, se llevó a cabo un proceso de secado a temperatura ambiente por cerca de 24 horas, seguido de un secado en estufa de circulación forzada a 110±5°C y por último, se sinterizaron a 1200°C por cerca de 5 horas en mufla eléctrica Terrigeno. Se caracterizó la composición química de las materias primas, barbotina y cerámica porosa por difracción de rayos X (DRX), Fluorescencia de rayos X (FRX) y Espectrometría de dispersión de energía de rayos X (EDS). Se analizó la resistencia a la flexión de las cerámicas porosas usando la Norma ISO 10545-4 y se analizó por SEM la morfología de las mismas. Se determinó la pérdida de masa, contracción lineal del material, densidad aparente y porcentaje de absorción de agua de las cerámicas, bajo la Norma ISO 10545-3. De acuerdo, a las proporciones establecidas de las materias primas, se obtuvo una composición química homogénea de la barbotina con una alta concentración de illita, cuarzo, calcita y en menor cantidad caolinita, y con altos contenidos de Si, Al y Ca con valores de 50.3, 23.2 y 10.4% respectivamente. Dentro del análisis morfológico a las espumas se observa una distribución homogénea en forma de panal con porosidades interconectadas y tamaños promedios de poro entre 0.7mm y 0.81mm. Mediante el análisis por SEM de la barbotina se evidenció la presencia de frústulas de algas fosilizadas del tipo: Pinnularia cf major junto con algunos fragmentos de Aulacoseira granulata mezclados en forma homogénea con cristales de calcita aglomerada con placas de caolín, y, para las cerámicas porosas los tamaños de poro varían entre 948.8nm y 55.67µm, presentando porosidades del orden nanométricos, micrométrico y macrométricas. Se aprecia que a menor densidad aparente aumenta la capacidad de retención de agua en la matriz cerámica. Así mismo, los porcentajes de pérdida de masa varían de 11.66 a 17.77%, la contracción lineal del material varía de 5.97 a 27%, y el porcentaje de absorción de agua oscilo entre 31.47 y 39.68%. Se evidencia que la resistencia a la flexión varía de 13.3MPa a 4.46MPa y la fuerza de rotura de 3547.25N a 1190N. Se concluye que esta composición química y método de conformado empleado, es óptimo para desarrollar cerámicas porosas dirigidas a diversos procesos de filtración y microfiltración de aguas y aceites.

# Epitaxial growth of graphene on GaN(0 0 0 1) surface: A first principles study

## Crecimiento epitaxial de grafeno sobre la superficie GaN(0 0 0 1): Un estudio por primeros principios

M J Espitia Rico<sup>1</sup>, M G Moreno-Armenta<sup>2</sup> and J A Rodríguez Martínez<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

<sup>3</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: mespitiar@udistrital.edu.co

**Abstract.** In this work the epitaxial growth of graphene on GaN(0 0 0 1) surface is studied by first principles total energy calculations. The idea is to understand how defect-free graphene can be grown on substrates. It is found that the most stable structures were a  $4 \times 4(0\ 0\ 0\ 1)\text{GaN}-3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$  graphene and a  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}(0\ 0\ 0\ 1)\text{GaN}$  Northrup bilayer  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$  graphene, grown under N and Ga-rich conditions, respectively. In these structures, graphene maintains its hexagonal honeycomb structure with the C-C bonds intact. Preservation of the  $\pi$ -network for the graphene layers was demonstrated by the presence of Dirac cones. The band structures for both the N and Ga-rich configurations show metallic characteristics and the Ga-rich configuration is slightly magnetic. This demonstrates that GaN(0 0 0 1) is an excellent substrate for supporting graphene layers. Calculations were performed at the DGCTIC-UNAM project code LANCAD-UNAM-DGTIC-150 and DGAPA IN114817.

**Resumen.** En este trabajo estudiamos el crecimiento epitaxial del grafeno sobre la superficie de GaN(0 0 0 1) por medio cálculos de primeros principios de energía total. El objetivo es entender como grafeno libre defectos puede ser crecido sobre este sustrato. Encontramos que las estructuras más estables fueron  $4 \times 4(0001)\text{GaN}-3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$  grafeno y  $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}(0\ 0\ 0\ 1)\text{GaN}$  bicapa de Northrup grafeno  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$ , crecidas bajo condiciones ricas de N y de Ga, respectivamente. En ambas superestructuras, el grafeno conserva su estructura hexagonal tipo panal de abejas con los enlaces C-C intactos. La conservación de la red- $\pi$  para las capas de grafeno fue comprobada por la presencia de los conos de Dirac. Las estructuras de bandas para las configuraciones ricas en N y en Ga muestran un comportamiento metálico y la configuración rica en Ga presenta un pequeño momento magnético. los cálculos fueron ejecutados en el marco del proyecto DGCTIC-UNAM código LANCAD-UNAM-DGTIC-150 and DGAPA IN114817.

## Evaluation of Colombian clays for obtaining ceramic pastes of high specific strength

## Evaluación de arcillas colombianas para la obtención de pastas cerámicas de alta resistencia específica

M A Domínguez Manuel<sup>1</sup>, S Betancourt<sup>1</sup>, M Betancurt Velez<sup>1</sup>, J D Martínez Angel<sup>1</sup> and I Carvajal Marin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia

Email: manuelalejandro.dominguez@upb.edu.co

**Abstract.** Clays are considered as a natural complex mineral. Their composition is a mixture of: aluminosilicates (clay minerals), other metal oxides such as: iron, calcium, titanium, etc. Some of them have presence of organic matter. Their mineralogical composition and structure is important in processing and final applications. Traditional ceramic is one of the main uses of this clays, where raw materials for ceramic pastes include: clay, feldspar, quartz and other mineral components. In fact, a clay paste can be defined as a mixture of clays, or clay and other earthy mineral substances, which are mixed using mechanical equipments and water, which acts as lubricating agent and dispersion medium. Finally, ceramic pastes are obtained with controlled final properties such as the density, the capture of humidity or mechanical properties. The aim of this work is a ceramic paste development with higher specific strength using 5 clays called: “Arcillolita brillante “(A\_B),” Arcillolita normal” (A\_N), “Toba fina” (T\_F), “Bentonita” (BENT) and “Montmorillonita” (MONT), obtained mostly from Colombian mines in the Antioquia region. All the clay minerals were characterized using X-ray diffraction, X-ray fluorescence and TGA-DTA thermogravimetric analysis. An experimental design type simplex-centroid mixture was implemented. The density of the paste after being sintered at 900°C, was chosen as the main response variable. The proportions of clays were mechanically mixed in a laboratory clay extruder. Test specimens were fabricated to meet the geometric characteristics established in ASTM C1161 for ceramic flexural properties. For evaluation of physical properties: density and moisture absorption the ASTM C127 standard mineral was used. The results obtained shown structural, compositional and thermal differences between each type of clay. Same behavior were founded for density and the mechanical properties after sintering. The combination of clay materials significantly affects the physical and mechanical properties of the sintered pastes. Finally, it was found that it is feasible to obtain a specific high strength ceramic paste from a tri-equivalent mixture in the composition of three of the studied clays.

**Resumen.** Las arcillas se consideran como un mineral natural complejo, constituido principalmente por una mezcla de: aluminosilicatos (minerales arcillosos), otros óxidos metálicos como hierro, calcio, titanio, etc.; y con presencia de materia orgánica. La estructura de las arcillas es determinante en el procesamiento y el comportamiento final de las aplicaciones para las cuales se destina. Uno de los principales usos es para la fabricación de cerámica tradicional, donde las materias primas para las pastas cerámicas incluyen principalmente: arcilla,

feldespato, cuarzo y otros componentes minerales. A su vez, una pasta de arcilla puede definirse como una mezcla de arcillas y otras sustancias minerales terrosas, que se mezclan empleando medios mecánicos y agua como agente lubricante y medio de dispersión. Mediante este método es posible obtener pastas cerámicas en las cuales es posible controlar propiedades finales como la densidad, la captación de humedad o propiedades mecánicas. El presente trabajo busca la obtención de una pasta cerámica de alta resistencia específica a partir de la combinación de 5 arcillas denominadas: Arcillolita brillante (A\_B), Arcillolita normal (A\_N), Toba fina (T\_F), Bentonita (BENT) y Montmorillonita (MONT), obtenidas en su mayoría de minas Colombianas de la región de Antioquia. A cada arcilla se le efectuó una caracterización estructural mediante difracción de rayos X, caracterización composicional química por medio de la técnica de fluorescencia de rayos X, análisis termogravimétrico TGA-DTA. Para el estudio se implementó un diseño experimental tipo diseño de mezclas tipo Simplex-Centroide teniendo la densidad de la pasta, luego de ser sinterizada a 900°C, como principal variable de respuesta. Las proporciones de arcillas fueron mezcladas mecánicamente en una extrusora de arcillas de laboratorio. A partir de las pastas obtenidas, se fabricaron probetas a fin de cumplir con características geométricas establecidas en la norma ASTM C1161 de determinación de propiedades de flexión de cerámicos. Para la evaluación de las propiedades físicas: densidad y absorción de humedad del mineral se empleó la norma ASTM C127. Los resultados obtenidos demostraron diferencias entre cada tipo de arcilla desde el punto de vista estructural, composicional, térmico, así como de la densidad y de las propiedades mecánicas luego de sinterizadas. La combinación de materiales arcillosos afecta significativamente las propiedades físicas y mecánicas de las pastas sinterizadas. Finalmente, se encontró que es viable la obtención de una pasta cerámica de alta resistencia específica a partir de una mezcla triequivalente en composición de tres de las arcillas estudiadas.

## Evaluation of the processing variables of the sol-gel technique on surface properties of silicon deposited on ceramic tiles

## Evaluación de las variables de procesamiento de la técnica de sol-gel en propiedades superficiales de silicio depositado sobre baldosas cerámicas

M A Domínguez<sup>1</sup>, M C Rincón<sup>1</sup>, C Rios<sup>2</sup>, J Trillos<sup>2</sup> and S Betancourt<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia

<sup>2</sup> Euroceramica, Colombia

Email: manuelalejandro.dominguez@upb.edu.co

**Abstract.** The sol-gel process has a scientific and technological importance as consequence of the advantages that this process offers to compare to traditional methods. For instance, in ceramic's synthesis of powders and coatings, the sol-gel process allows obtaining materials at low processing temperatures including room temperature. This kind of materials has been widely recognized by high purity coatings, complex forms, high surface areas, and capacities. The sol-gel process allows the use of different nature substrates, which can be deposited with functional coatings such as: self-cleaning, air purifiers, bactericides, photoluminescent, anti-grease, luminescent (luminophores), among others. The properties and the final structure of the material depend on several processing parameters such as pH reaction, reagent stability, water quantity, temperature, stirring speed and drying time, among others. In this research, a hydrolysis of a miscible solution in the acid medium based on tetraethyl orthosilicate (TEOS), ethanol and water was synthesized and deposited on the surface of an enamel of a ceramic. For the synthesis, four concentrations of TEOS were chosen to perform different tests such as: 70%, 55%, 40% and 25% with their respective proportions of ethanol and water for each one. All concentrations considering the miscibility diagram for: tetraethyl orthosilicate with ethanol and water. The solutions were aged at different times: 0, 24 and 48 hours. The deposition was performed on floor-type tiles, using the dip coating technique, using the controlled frame speed of a universal test machine INSTRON 5582. Speeds of 1, 5 and 10mm/sec were evaluated. The deposited pieces were dried in a convection oven at 90°C for 1 hour. Then they were taken to a heat treatment in a muffle for 4 hours at different temperatures: 400, 500 and 600°C. The response variable was the microhardness and the wettability was evaluated by means of the sessile drop technique with a contact angle equipment. The results obtained shown that the sol-gel silicon solution provides a qualitative final aspect brighter than the tile without being deposited, increases the hardness of the surface, represented by an increase in the microhardness of 15% against the uncoated ceramic tile. Regarding the contact angle, it was found that the coated samples decrease the wettability, without reaching hydrophobic conditions at the surface.

**Resumen.** La importancia científica y tecnológica del proceso sol-gel para la síntesis de polvos cerámicos y recubrimientos, se debe principalmente a las ventajas que dicho proceso ofrece frente a los métodos tradicionales, permitiendo obtener recubrimientos de alta pureza, formas

complejas, altas áreas superficiales y capacidades de procesamiento a bajas temperaturas incluyendo al ambiente. Mediante el proceso sol-gel se posibilita el uso de sustratos de diferente naturaleza en los cuales se logran depositar recubrimientos con funciones tales como: auto limpieza, purificadores de aire, bactericidas, fotoluminiscentes, anti grasa, luminiscentes (luminóforos), entre otros. Las propiedades y la estructura final del material dependen de varios parámetros como el pH de reacción, estabilidad de los reactivos, cantidad de agua, temperatura, velocidad de agitación, temperatura y tiempo de secado, entre otros. Para esta investigación se usó como precursor el Tetraetilo ortosilicato (TEOS) junto con Etanol y Agua buscando generar una solución miscible la cual pudiera ser depositada sobre una baldosa en forma de esmalte, adicional a ello el proceso se realizó en medio ácido para favorecer la hidrólisis en la reacción. Teniendo en cuenta el diagrama de miscibilidad para: el tetraetil ortosilicato con etanol y agua, se eligieron cuatro concentraciones de TEOS para realizar diferentes ensayos, tales como 70%, 55%, 40% y 25% con sus respectivas proporciones de etanol y agua para cada uno. Posterior a la preparación de las soluciones, se procedió a añejarlas durante diferentes escalas de tiempo: 0, 24 y 48 horas. La deposición se realizó sobre baldosas tipo revestimiento para piso, utilizando la técnica dip coating; empleando la velocidad controlada del bastidor de una máquina universal de ensayos INSTRON 5582. Se evaluaron velocidades de 1, 5 y 10mm/seg. La pieza depositada se secó en un horno por convección a 90°C durante 1 hora. Luego fue sometida a tratamiento térmico en mufla durante 4 horas a diferentes temperaturas: 400, 500 y 600°C. Como variable de respuesta se eligió la microdureza y adicionalmente se evaluó la mojabilidad mediante la técnica de gota en reposo con un equipo de ángulo de contacto. A partir de los resultados obtenidos de los experimentos llevados a cabo durante este proyecto puede concluirse que la solución sol-gel de silicio aporta un aspecto cualitativo final más brillante que la baldosa sin ser depositada, aumenta la dureza de la superficie, representado en un aumento en la microdureza del 15 % frente a la baldosa cerámica no recubierta. Respecto al ángulo de contacto, se encontró que las muestras recubiertas disminuyen la mojabilidad, sin esto significar que la superficie alcance condiciones hidrófobas.

## Fabrication of open pore magnesium foams: Liquid infiltration

## Fabricación de espumas de magnesio de poro abierto: Infiltración por vía líquida

J F Velásquez Restrepo<sup>1</sup>, P Fernández Morales<sup>1</sup>, V M Posada Pérez<sup>2</sup>, J F Ramírez Patiño<sup>2</sup>,  
J Rúa Juan<sup>1</sup> and J D López Carmona<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

Email: [juanfelipe.velasquezre@upb.edu.co](mailto:juanfelipe.velasquezre@upb.edu.co)

**Abstract.** Magnesium foams due to their excellent strength-weight ratio are considered a structural material with potential applications in the transport sector such as aerospace, automotive and rails, in applications as energy absorption, soundproofing, heat exchangers and others. In recent years, these materials are outlined as a material for regenerative medicine. Recent studies show the biocompatibility of some magnesium alloys and possible uses as bone implants. Its low density, structural capacity and biodegradability are the main factors that position it, as a possible substitute for the implants used today. It is proposed a porous structure that allows the interaction through the implant of body fluids, promoting bioactivity and helps bioabsorption by metabolizing the metal matrix. It also pretends to improve the stress conditions, since the stiffness modulus of the porous material would be much more compatible with the bone structure unlike the current implants, decreasing the risk of a stress shielding rejection. This article will show the process of manufacturing open-pore magnesium foam at laboratory scale with potential use in implants. Specifically, the AZ31, magnesium alloy is considered one of the most suitable for bone implants. NaCl was used as a preform for foam pores and Argon was used as the atmosphere controlling agent.

**Resumen.** Las espumas de magnesio por su excelente relación de peso-resistencia, es considerado un material estructural con posibles aplicaciones en el sector del transporte como el aeroespacial, automotriz y férreo, en aplicaciones como absorción de energía, insonorización, intercambiadores de calor, entre otros. En los últimos años se perfilan como un material para la medicina regenerativa. Estudios recientes muestran la biocompatibilidad de algunas aleaciones de magnesio y el posible uso como implantes óseos. La baja densidad, capacidad estructural y ser biodegradable son los principales factores que lo posicionan como posible sustituto de los implantes usados en la actualidad. Se propone una estructura porosa que permita el paso de los fluidos corporales fomentando la bioactividad y así mismo ayude a la bioabsorción por metabolización del metal de la matriz. Se pretende igualmente, mejorar las condiciones de esfuerzos, dado que el módulo de rigidez del material poroso sería mucho más compatible con la estructura ósea a diferencia de los implantes actuales, disminuyendo el riesgo de un rechazo por apantallamiento de esfuerzos. En este trabajo se mostrará el proceso de fabricación de espumas de magnesio de poro abierto a escala de laboratorio con potencial uso en implantes. Específicamente, se usa la aleación de magnesio AZ31, considerada una de las más adecuadas

para implantes óseos. Se utilizó el NaCl como preforma de los poros de la espuma y se usó Argón como agente controlador de la atmósfera.



## First-Principles study of electronic and magnetic properties for Cr-doped bulk NbN

## Estudio de primeros principios de las propiedades electrónica y magnética para el volumen del NbN dopado con Cr

G E Suarez Mora<sup>1</sup>, J F Murillo Garcia<sup>1</sup> and C Ortega López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

Email: carmelero5@hotmail.com

**Abstract.** First-principles calculations were implemented to study the electronic and magnetic properties for Cr-doped bulk NbN-2x2x4 in the spatial configuration NiAs, using the pseudopotential method. By means of the generalized gradient approximation (GGA) in the Perdew-Burke-Emzerhof scheme we were observed that the substitution of two Cr atoms by Nb, for a relative Cr-Cr distance of about 11.5Å in the z-direction, presents a metallic behavior and induces a magnetic moment of 0.75 $\mu$ B per cell. The results of structural optimization show that the presence of Cr atoms does not generate any geometric distortion preserving the orientation of NiAs-type bonds.

**Resumen.** Cálculos de primeros principios fueron implementados en el estudio de las propiedades electrónica y magnética para el volumen del NbN-2x2x4 dopado con átomos de Cr en la configuración espacial NiAs, usando el método del pseudopotencial. Mediante la aproximación de gradiente generalizado (GGA) en el esquema de Perdew-Burke-Emzerhof se observó que la sustitución de dos átomos de Cr por Nb, para una distancia relativa Cr-Cr de aproximadamente 11.5Å en la dirección z, presenta un comportamiento metálico e induce un momento magnético de 0.75 $\mu$ B por celda. Los resultados de la optimización estructural muestran que la presencia de los átomos de Cr no genera ninguna distorsión geométrica preservando la orientación de los enlaces tipo NiAs.

# First-principles study of electronic and magnetic properties of the 2D-hexagonal monolayer Mn-doped AlN

## Estudio de primeros principios de las propiedades electrónicas y magnéticas de la monocapa 2D-hexagonal AlN dopado con Mn

G A Berrio Cordero<sup>1</sup>, F E Peniche Blanquicett<sup>1</sup> and J F Murillo Garcia<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

Email: gberrioc@gmail.com

**Abstract.** In this work, we made a study of the substitution of one Mn atom on a hexagonal two-dimensional AlN monolayer, in the hexagonal 2x2 geometry. The calculations are carried out using Density Functional Theory (DFT) in the generalized gradient approximation with the Perdew-Burke-Ernzerhof parametrization (GGA-PBE) using pseudopotential method. The substitution of Al atom by Mn generates a change in the semiconductor character of AlN monolayer being observed a semimetal character with  $4\mu\text{B}/\text{cell}$ , generated by the spin-up states.

**Resumen.** En este trabajo, se hizo un estudio de la sustitución de un átomo de Mn sobre una monocapa de AlN-2x2 hexagonal bidimensional. Los cálculos se realizan usando la teoría del funcional de la densidad (DFT) en la aproximación de gradiente generalizado con la parametrización de Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) usando el método del seudopotencial. La sustitución del átomo de Al por Mn genera un cambio en el carácter semiconductor de la monocapa de AlN observándose un carácter semimetálico con  $4\mu\text{B}/\text{celda}$ , generado por los estados de spin arriba.

## Gadolinium-doped NbN: A first principles study

### NbN dopado con gadolinio: Un estudio de primeros principios

G E Suarez Mora<sup>1</sup>, M J Espitia Rico<sup>2</sup> and C Ortega López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia

Email: carmelero5@hotmail.com

**Abstract.** In this work, calculations of first principles are reported to investigate the structural and electronic properties of the niobium nitride (NbN) compound, in the NiAs-type hexagonal phase. Calculations are performed using the theory functional density within the framework of the generalized gradient approximation (GGA-PBE) and pseudopotential method. The NbN matrix is modeled using the supercell scheme. The supercell  $2 \times 2 \times 4$  NbN, contains 64 atoms: 32 Nb atoms and 32 N atoms, this is 32 molecules of Nb-N. The substitution of two Nb atoms by two Gd atoms represents a doping of 6.25% Gd. A generalized representation of this situation is  $Nb_{1-x}Gd_xN$ , for our case  $Nb_{0.9375}Gd_{0.0625}N$ . From the results, it is found that the value of the lattice constant is 2.88Å, for the matrix without impurities of Gd and 2.80Å, with impurities of Gd. Something similar happens for constants  $c$  and  $c'$ , without and with impurities of Nb; then the effect of Gd impurities on the structural properties of NbN is to increase the rigidity of the material. From the analysis of the density of states (DOS), it is established that the compound NbN with impurities of Gd presents metallic and ferromagnetic behavior: with a value from the total magnetic moment by supercell  $M_t = 15.00 \mu_B/\text{super cell}$ .

**Resumen.** En este trabajo, se reportan cálculos de primeros principios para investigar las propiedades estructurales y electrónicas del compuesto nitruro de niobio (NbN), en la fase hexagonal tipo NiAs. Los cálculos se realizan utilizando la teoría de la funcional densidad en el marco de la aproximación de gradiente generalizado (GGA-PBE) y el método del pseudopotencial. La matriz NbN se modela usando el esquema de la supercelda. La supercelda  $2 \times 2 \times 4$  NbN, contiene 64 átomos: 32 átomos de Nb y 32 átomos de N, esto es 32 moléculas de Nb-N. La sustitución de dos átomos de Nb por dos átomos de Gd, representa un dopado del 6.25% de Gd. Una representación generalizada de esta situación es  $Nb_{1-x}Gd_xN$ , para nuestro caso  $Nb_{0.9375}Gd_{0.0625}N$ . De los resultados, se encuentra que el valor de la constante de red es 2.88Å, para la matriz sin impurezas de Gd y de 2.80Å, con impurezas de Gd. Algo similar ocurre para las constantes  $c$  y  $c'$ , sin y con impurezas de Nb; luego el efecto de las impurezas de Gd, en las propiedades estructurales del NbN, es incrementar la rigidez del material. Del análisis de la densidad de estados (DOS), se establece que el compuesto NbN con impurezas de Gd presenta comportamiento metálico y ferromagnético: con un valor del momento magnético total por supercelda  $M_t = 15.00 \mu_B/\text{super cell}$ .

## Hydrothermal synthesis of $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$ (CZTiS) and $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) materials by a hydrothermal route in two reaction stages

### Síntesis hidrotérmica de materiales tipo $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$ (CZTiS) y $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS), mediante una ruta hidrotérmica en dos etapas de reacción

M Muñoz<sup>1</sup>, J A Gómez<sup>1</sup> and E Vera López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: [ingenero.mauricio.munoz@gmail.com](mailto:ingenero.mauricio.munoz@gmail.com)

**Abstract.** As result of the growing demand for new sources of clean and renewable energy, different fields of engineering and materials have come to investigate new alternatives where photovoltaic energy and the materials with which these devices conform have innovated with CZTS type semiconductors ( $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ ) and ( $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$ ), a compound that, despite being a quaternary material very similar to CIGS ( $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{1-x}\text{S}_2$ ) materials (materials applied to photovoltaic cells par excellence), represent a large In addition to not involving materials that are difficult to acquire and highly polluting, such as selenium or gallium, they have a high absorption coefficient (greater than  $10^4\text{cm}^{-1}$ ) and a desirable band gap ( $\sim 1.45\text{eV}$ ) ideal conditions for the application required, which makes them a very attractive alternative to the replacement of these materials. This research is based on the synthesis of two photovoltaic materials type  $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$  (CZTiS) and  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  (CZTS), by means of a hydrothermal route, starting from soluble copper, zinc, titanium, tin isopropoxide and thiourea nitrate precursors, dissolved in water Ionized in concentrations of  $1\text{molL}^{-1}$ . For the synthesis of each material the respective precursors were dosed in a steel autoclave equipped with a teflon jacket under magnetic stirring (150rpm) and at a temperature of  $300^\circ\text{C}$  for 24 hours in order to promote the formation of the respective phases ceramics. The materials obtained at the end of the preliminary stage were washed with absolute ethanol repeatedly until crystalline appearance solids were obtained. Subsequently, in order to promote the preparation of pure crystalline phases, the materials were subjected to a second reaction stage in a furnace at  $400^\circ\text{C}$  in He flow ( $50\text{mLmin}^{-1}$ ), for the purpose of reduce the concentration of secondary phases of sulphides. The characterization of the CZTiS and CZTS materials was performed by X-Ray Diffraction (XRD) in a PANalytical X'pert High Score equipment between  $10$  and  $90^\circ$ , revealing that the effect of titanium with a higher ionic radius than that of tin produces a distortion in the unit cell of the CZTiS material compared to that reported for the CZTS system. The detailed analysis and refinement Rietveld demonstrated in both cases the conformation of a Kesterite type structure with glass sizes of the nanometric order ( $10\text{-}20\text{nm}$ ). The results of Scanning Electron Microscopy (SEM) confirm the obtaining of aggregates of a regular form with composition consistent with the proposal theoretically and validated by techniques of Energy Dispersive X-ray spectrometry (EDX) and comparison between secondary emission spectra And retro-dispersed. The electrical characterization by solid state impedance (IS) spectroscopy showed a p-type semiconductor behavior in both materials with conductivity values of the order of  $0.01\text{-}$

0.1Scm<sup>-1</sup>. These results confirm the effectiveness of the developed synthesis process and validate the methodology for obtaining photovoltaic materials for potential applications.

**Resumen.** A raíz de la creciente demanda de encontrar nuevas fuentes de energía limpia y renovable, diferentes campos de la ingeniería y los materiales han entrado a investigar nuevas alternativas donde la energía fotovoltaica y los materiales con los que se conforman estos dispositivos han innovado con semiconductores tipo CZTS en fase (Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub>) y (Cu<sub>2</sub>ZnTiS<sub>4</sub>), un compuesto ya que a pesar de ser un material cuaternario muy parecido a los materiales tipo CIGS (CuIn<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>S(Se)<sub>2</sub>) (materiales aplicados a celdas fotovoltaicas por excelencia), representan una gran ventaja frente a ellos, pues además de no involucrar materiales de difícil adquisición y altamente contaminantes como es el caso del selenio o galio, presentan un alto coeficiente de absorción (mayor a 10<sup>4</sup>cm<sup>-1</sup>) y una brecha energética (band gap) deseable (~1.45eV) condiciones ideales para la aplicación requerida, lo que los hace una alternativa muy atractiva al remplazo de estos materiales. Esta investigación se basa en la síntesis de dos materiales fotovoltaicos tipo Cu<sub>2</sub>ZnTiS<sub>4</sub> (CZTiS) y Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> (CZTS), mediante una ruta hidrotérmica, partiendo de precursores solubles de nitrato de cobre, estaño, cinc, isopropóxido de titanio y tiourea, disueltos en agua des-ionizada en concentraciones de 1molL<sup>-1</sup>. Para la síntesis de cada material se dosificaron los respectivos precursores en una autoclave de acero dotada con una camisa de teflón bajo agitación magnética (150 rpm) y a una temperatura de 300°C durante 24 horas con el fin de promover la formación de las respectivas fases cerámicas. Los materiales obtenidos al final de la etapa preliminar, se lavaron con etanol absoluto en repetidas ocasiones hasta la obtención de sólidos de apariencia cristalina. De forma posterior y con el fin de promover la obtención de fases cristalinas puras, los materiales fueron sometidos a una segunda etapa de reacción en un horno tubular a 400°C en flujo de He (50mLmin<sup>-1</sup>), con el propósito de reducir la concentración de fases secundarias de sulfuros. La caracterización de los materiales de CZTiS y de CZTS se realizó mediante difracción de rayos X (XRD), en un equipo PANalytical X'pert High Score entre 10 y 90°, revelando que el efecto del titanio con un mayor radio iónico que el del estaño genera una distorsión en la celda unidad del material de CZTiS en comparación con el reportado para el sistema CZTS. El análisis detallado y por refinamiento Rietveld demostró en ambos casos la conformación de una estructura tipo Kesterita con tamaños de cristal del orden nanométrico (10-20nm). Los resultados de los análisis por microscopía electrónica de barrido (SEM), confirman la obtención de agregados de forma regular con composición consistente con la propuesta teóricamente y validada mediante técnicas de espectroscopía de dispersión de rayos X (EDX) y comparación entre espectros de emisión secundarios y retrodispersados. La caracterización eléctrica mediante espectroscopía de impedancias de estado sólido (IS), demostró un comportamiento semiconductor tipo p en ambos materiales con valores de conductividad del orden de 0.01-0.1Scm<sup>-1</sup>. Estos resultados confirman la efectividad del proceso de síntesis desarrollado y validan la metodología para la obtención de materiales fotovoltaicos para potenciales aplicaciones.

## Inclusion of geopolymers derivated from fly ash and pumice in reinforced concrete

## Inclusión de geopolímeros derivados de ceniza volante y piedra pómez en concreto reforzado

G Baron Gualdron<sup>1</sup>, A M Montaña Angarita<sup>1</sup>, R Atencio<sup>2</sup>, P E Vera Bautista<sup>3</sup>, D C Castro Rodriguez<sup>4</sup> and C P González Cuervo<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, Venezuela

<sup>3</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

<sup>4</sup> Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México

Email: gcbarong@gmail.com

**Abstract.** This paper presents results of a research project related to the development of alkali-activated geopolymers, synthesized from aluminosilicate minerals (fly ash and pumice) which are added to concrete. Alkali sources used in geopolymer synthesis were sodium hydroxide and sodium silicate solution. New materials were structurally characterized by Infrared Spectroscopy (IR) and X-Ray powder Diffraction (XRD). Concretes obtained after geopolymers addition as Portland cement substitutes at 10%, 20% and 30%, were mechanically analyzed by compression resistance at 7, 14, 28 and 90 drying days. Results were referred to standard (concrete of Portland cement) allows to know cementitious characteristics of geopolymers are lower than those for standard, but it keeps growing at longer drying time than Portland cement. By Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS) it is found that these new materials show high electrical resistance and have been proved as a protection agents against corrosion in reinforced concrete exhibiting anti-corrosive properties higher than those showed by the conventional concrete mixture.

**Resumen.** Se presentan los resultados de la síntesis y caracterización de geopolímeros a partir de la activación alcalina de los aluminosilicatos ceniza volante (CV) y piedra pómez (PP); los cuales posteriormente fueron adicionados a concreto. Para la síntesis de los geopolímeros se usaron soluciones de Hidróxido de Sodio (NaOH) y Silicato de Sodio (Na<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>). La caracterización estructural de los nuevos materiales fue realizada por espectroscopia de infrarrojo (IR) y difracción de rayos x de policristal (XRD). Los concretos obtenidos luego de la adición de geopolímeros como sustituyentes en un 10, 20 y 30% del contenido de cemento Portland, fueron analizados con pruebas mecánicas para 7, 14, 28 y 90 días de fraguado, para determinar su resistencia a la compresión. Los resultados obtenidos fueron comparados con las mezclas patrón (concreto de Cemento Portland), encontrándose resistencias mecánicas inferiores a las del cemento convencional, pero con incremento persistente en dicho valor, aún para tiempos de fraguado muy superiores a los de aquel. Utilizando espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) se logró establecer que los geopolímeros sintetizados muestran una elevada

resistencia eléctrica y una protección a la corrosión mucho mayor a la ofrecida por el cemento convencional.

## Influence of MWCNT/surfactant dispersions on the mineralogical and mechanical properties of portland cement pastes

## Influencia de deispersiones de MWCNT/surfactantes sobre las propiedades mineralogicas y macánicas de pastas de cemento portland

**B Rodriguez<sup>1</sup>, O A Mendoza Reales<sup>2</sup>, R D Toledo Filho<sup>2</sup>, J C Ochoa Botero<sup>3</sup>, Y P Arias<sup>3</sup> and J H Quintero Orozco<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad de Medellín, Medellín, Colombia

<sup>2</sup> Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

<sup>3</sup> Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

Email: brayhner@outlook.com

**Abstract.** This work studies the reinforcing effect of Multi Walled Carbon Nanotubes (MWCNT's) on cement pastes. A 0.35% solid concentration of MWCNT's in powder was dispersed in deionized water with sodium dodecyl sulfate (cationic surfactant), cetylpyridinium chloride (anionic surfactant) and triton X-100 (amphoteric surfactant) using an ultrasonic tip processor. Three concentrations of each surfactant (1mM, 10mM, and 100mM) were tested, and all samples were sonicated until an adequate dispersion degree was obtained. Cement pastes with additions of 0.15% MWCNT's by mass of cement were produced in two steps; first, the dispersions of MWCNT were combined with the mixing water using an ultrasonic tip processor to guarantee homogeneity, and then cement was added and mixed until a homogeneous paste was obtained. Mineralogical properties and mechanical strength of the samples cured 7 days were studied by X-ray diffraction, thermogravimetric analysis, direct tension and three point bending tests. It was found that the MWCNT/surfactants dispersions do not modify the mineralogical properties of cement pastes, but decrease the mechanical properties of the cement based matrix due to an increased porosity. Nevertheless, it was possible to identify a positive reinforcing effect of MWCNT when comparing samples of the same density class.

**Resumen.** Este trabajo estudia los efectos de reforzamiento en pastas de cemento debidos a la inclusión de Multi Walled Carbon Nanotubes (MWCNT's). Una concentración solida de 0.35% de MWCNT's en polvo fue dispersada en agua desionizada con sodium dodecyl sulfate (surfactante cationico), cetylpyridinium chloride (surfactante aniónico) y triton X-100 (surfactante atmosférico) usando una punta ultrasónica. Tres concentraciones de cada surfactante fueron realizadas (1mM, 10mM and 100mM) y todas las muestras fueron sonicadas hasta obtener un grado de dispersión adecuado. Las pastas de cemento con adiciones de 0.15% MWCNT's por masa de cemento fueron producidas en dos pasos, primero las dispersiones de MWCNT's fueron combinadas con mezclas de agua usando la punta ultrasónica para asegurar homogeneidad y luego el cemento fue adherido y mezclado hasta la aparición de una pasta homogénea. Propiedades mineralógicas y mecánicas de las muestras curadas por siete días fueron estudiadas por medio de Difracción de Rayos X (XRD), Análisis Termogavimétrico,



Tensión Directa y Pruebas de Flexión de Tres Puntos. Fue encontrado que las dispersiones de MWCNT/surfactantes no modifican las propiedades mineralógicas, pero si decrementan las propiedades mecánicas debido a un incremento en la porosidad. Sin embargo, fue posible identificar un efecto de reforzamiento debido a los MWCNT cuando se comparan muestras de la misma clase de densidad.

## New materials development with potential applications in (bio)materials for bone implants

## Desarrollo de nuevos materiales con potenciales aplicaciones en biomateriales para implantes óseos

M Pereyra<sup>1</sup>, E Méndez Morales<sup>1</sup>, B Fernandez<sup>1</sup>, L Gil Lozada<sup>2</sup> and P A Tsygankov<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

<sup>2</sup> Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Puerto Ordaz, Venezuela

<sup>3</sup> Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Email: mpereyra05@gmail.com

**Abstract.** The development of new (bio)materials for bone repairment (substitution and defects filling) is a key area in material science research. Titanium is one of the most used materials for its physicochemical and biological properties. HA coating on different substrates have been used to improve biocompatibility of bone implants. The present work is an interdisciplinary research where four laboratories from different countries had joined to develop innovative materials with potential use as (bio)material for medical applications. Commercial HA detonation gun coating on different substrates were morphological and physicochemical analyzed by FTIR, XRD, EDS and SEM. The substrates used were Ti (99.8%), Sponge Ti, Ti-6Al-4V, Tantalum and Carbon Composite. The results obtained are promising, although, more research in biological environment is needed.

**Resumen.** El desarrollo de nuevos biomateriales para la reparación ósea (sustitución y defectos) es un área clave en la investigación en ciencia de materiales. El Titanio es uno de los materiales más usados por sus propiedades fisicoquímicas y biológicas. Los recubrimientos de HA sobre diferentes sustratos se han utilizado para mejorar la biocompatibilidad de los implantes óseos. El presente trabajo es una investigación interdisciplinaria donde cuatro laboratorios de diferentes países se juntaron para desarrollar materiales de innovación con potencial uso en biomateriales para aplicaciones médicas. Recubrimiento de HA comercial generada por técnica "detonation gun" sobre varios sustratos fueron analizados fisicoquímica y morfológicamente por técnicas de FTIR, XRD, EDS and SEM. Los sustratos utilizados fueron Ti (99.8%), Sponge Ti, Ti-6Al-4V, Tántalo y Compósito de Carbono. Los resultados obtenidos son prometedores, sin embargo, más investigaciones en medio biológico son necesarias.

## Nitrogene doped with phosfurus: An ab initio study

## Nitrogene dopado con fósforo: Un estudio ab initio

C Ortega López<sup>1</sup>, J F Murillo Garcia<sup>1</sup> and L C Sanchez Pacheco<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

Email: cesarorlo@gmail.com

**Abstract.** In 2015, J. Lee et al proposed the 2D honeycomb monolayers of pnictogens (N, P, As, Sb, Bi). Especially, they predicted the existence of the 2D honeycomb monolayer of nitrogen atoms, which we call nitrogene. In 2016, Li Jie-Sen et al. studied the structure and properties of the nitrogene monolayer. They found that the band structure of the nitrogene can be modified in several ways: by controlling the stacking of the monolayers, applying a biaxial tensile strain, and applying a perpendicular electric field. In this work, a study is made of the substitution of a phosphorus atom by a nitrogen atom in a monolayer of nitrogen, in 4x4 hexagonal geometry. The calculations are performed using the Density Functional Theory within the generalized Perdew-Burke-Ernzerhof gradient approximation (GGA-PBE) with ultrasoft pseudopotentials and a plane wave base as implemented in the Quantum-ESPRESSO package. The monolayer is modelled using the periodic Slab scheme. It was found that the substitution of phosphorus by nitrogen, slightly affect the structural properties of the monolayer. Finally, the density of nitrogen monolayer with and without phosphorus impurities is analyzed in detail.

**Resumen.** En 2015, J. Lee y colaboradores propusieron las monocapas de panel de abeja 2D de pnictogens (N, P, As, Sb, Bi). Especialmente, predijeron la existencia de la monocapa de panel de abeja 2D de átomos de nitrógeno, la cual llamamos nitrogene. En 2016, Li Jie-Sen y colaboradores estudiaron la estructura y las propiedades de la monocapa nitrogene. Encontraron que la estructura de banda del nitrogene puede ser modificada de varias maneras: controlando el apilamiento de las monocapas, aplicando una tensión biaxial por tracción, y aplicando un campo eléctrico perpendicular. En este trabajo, se hace un estudio de la sustitución de un atómico fósforo por un átomo de nitrógeno en una monocapa de nitrógeno, en la geometría hexagonal 4x4. Los cálculos se ejecutan, usando la teoría de la funcional de la densidad (DFT: Density Functional Theory) dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) con seudopotenciales ultrasuaves y una base de ondas planas como se implementa en el paquete Quantum-ESPRESSO. La monocapa se modela usando el esquema de Slab periódico. Se encuentra que la sustitución de fósforo por nitrógeno, afectan ligeramente las propiedades estructurales de la monocapa. Finalmente, se analiza en detalle la densidad de estados de la monocapa de nitrogene con y sin impurezas de fósforo.

## Performance of additions in concrete with black slags and protection of reinforcement steel

## Desempeño de adiciones en concretos con escoria negra y protección del acero de refuerzo

Y A Pérez Rojas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: yasmin.perez@uptc.edu.co

**Abstract.** This project aims to give alternative uses to some of the waste from the steel by-industry in the Department of Boyacá, including them as additions in the manufacture of mixtures of hydraulic concrete for the construction of road works. Knowledge of the relationships between the composition of materials, hydration products and their impact on the development of mechanical properties and durability remains insufficient. For this reason, it is necessary to generate regulations that provide confidence in the use of these alternative materials, as well as design letters and regulations adjusted to the local context. The research project is experimental and seeks to evaluate the behavior of concrete by modifying its dosage with additions such as the electric arc furnace slag (EAFS) replacing the coarse aggregate and recycled glass fibers to replace the fine aggregate. The properties to be evaluated are the simple compression strength, corrosion resistance of reinforcing steel, density, voids and absorption. Electronic scanning (SEM/EDX), X-ray diffraction (XRD) and ultrasound wave velocity techniques will be employed. The evaluation of the modified concrete with additions will be compared against a standard sample made with traditional portland concrete (CP) and natural aggregates available in the region. The recycled ground glass will be obtained by mechanical maceration of glass bottles used in a crushing machine. These additions must comply with the technical specifications in terms of granulometry. The methods of concrete design will be the Fuller method, ACI, fineness modulus method of aggregate combination and Walker method. The procedures and tests performed will be standardized so that the results are iterative and reproducible. The results of the research will show if the additions used improve the properties studied. The interest of the project is to achieve competent, standardized and eco-efficient construction materials from industrial waste that today do not represent any value, seeking that the results of the project be applied as an investment alternative of the official entities for the construction of works of infrastructure of excellent quality at a lower cost in the Department of Boyacá. The contribution of the project to the generation of new knowledge is framed in obtaining the model of prediction of the modulus of elasticity, compressive strength  $f_{cf}$  of the concrete added, strain-strain curve; That conform to the tendencies of the construction supplies available in the Department of Boyacá. This contribution is of great importance due to the fact that research related to additions to concrete has already been carried out without being put into practice due to the lack of design letters or mathematical formulation that supports the progress made in its application and that are adjusted to the local conditions of construction.

**Resumen.** Este proyecto buscar dar usos alternativos a algunos de los residuos provenientes de la actividad siderúrgica en el Departamento de Boyacá, mediante su inclusión como adiciones en la fabricación de las mezclas del concreto hidráulico para la construcción de obras viales. El conocimiento de las relaciones entre la composición de los materiales, los productos de hidratación y su impacto en el desarrollo de propiedades mecánicas y de durabilidad sigue siendo insuficiente. Por esta razón se hace necesario la generación de reglamentación que brinde confianza en el uso de estos materiales alternativos, así como cartas de diseño y normatividad ajustado al contexto local. El proyecto de investigación es experimental y busca evaluar el comportamiento de los concretos modificando su dosificación con adiciones como la escoria de horno de arco eléctrico (EAFS) en reemplazo del agregado natural gruesos y fibras de vidrio reciclado en reemplazo del agregado fino. Las propiedades a evaluar son la resistencia a la compresión simple, resistencia a la corrosión del acero de refuerzo, densidad, vacíos y absorción. Se emplearán técnicas de microscopia de barrido electrónico (SEM/EDX), difracción de rayos X (XRD) y velocidad de onda de ultrasonido. La evaluación del concreto modificado con adiciones será comparada frente a una muestra patrón elaborado con concreto portland tradicional (CP) y agregados naturales disponibles en la región. El vidrio molido reciclado se obtendrá mediante maceración mecánica de botellas de vidrio usadas en una máquina trituradora. Estas adiciones deberán cumplir las especificaciones técnicas en cuanto a granulometría se refiere. Los métodos de diseño del concreto serán el método Fuller, ACI, método del módulo de fineza de la combinación de agregados y método de Walker. Los procedimientos y ensayos realizados serán normalizados para que los resultados sean iterativos y reproducibles. Los resultados de la investigación mostraran si las adiciones usadas mejoran las propiedades estudiadas. El interés del proyecto es lograr materiales de construcción competentes, estandarizados y eco-eficientes a partir de residuos industriales que hoy no representan valor alguno, buscando que los resultados del proyecto sean aplicados como una alternativa de inversión de las entidades oficiales para la construcción de obras de infraestructura de excelente calidad a un menor costo en el Departamento de Boyacá. El aporte del proyecto a la generación de nuevo conocimiento se enmarca en la obtención del modelo de predicción del módulo de elasticidad, resistencia a la compresión  $f'_{cf}$  del concreto adicionado, curva esfuerzo-deformación; que se ajusten a las tendencias de los insumos de construcción disponibles en el Departamento de Boyacá. Este aporte es de gran importancia debido a que ya se han adelantado investigaciones relacionadas con adiciones al concreto, sin que sean llevadas a la práctica debido a que no se cuenta con las cartas de diseño o formulación matemática que respalde los avances obtenidos para su aplicación y que sean ajustadas a las condiciones locales de construcción.

## Production of activated coal from wood wastes

## Producción de carbón activado a partir de residuos de la madera

A P Ramirez Muñoz<sup>1</sup>, S Giraldo Ardila<sup>1</sup>, E Flórez Yepes<sup>1</sup>, M Ulloa<sup>1</sup> and N Acelas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Medellín, Medellín, Colombia

Email: anyipao0804@hotmail.com

**Abstract.** Cedarwood (*Cedrela Angustifolia*) is one of the most used wood in the manufacture of musical instruments and furniture. This type of wood presents high durability, is light and easy to work. The manufacture of these products generates large amounts of wastes, which causes environmental problems in their disposal. In this study, it is given an added value to a residual biomass (sawdust) generated in the cedarwood manufacturing industry, by transforming it into an activated material. Thermogravimetric analysis was used to determine the composition of the material in terms of moisture, volatile material, fixed carbon and ash. The surface area and pore distribution of the activated carbon was determined following the BET method (ASAP). Its morphology and the elemental surface analysis was determined using SEM-EDS. FTIR analysis was used to know the active functional groups. The activated material was used for the removal of two industrial dyes (C1 and C2), which generate aquatic ecosystems contamination. The experimental results showed high viability to use this material as an adsorbent in water with percentages of removal higher than 90% and 40% for C1 and C2 respectively.

**Resumen.** La madera de cedro (*Cedrela Angustifolia*) es una de las más utilizadas para la fabricación de instrumentos musicales y diferentes tipos de muebles dado que presenta alta durabilidad, es liviana y fácil de trabajar. En la obtención de estos productos se generan grandes cantidades de residuos lo cual ocasiona problemas medioambientales en su disposición. En este estudio, se le de valor agregado a la biomasa residual (aserrín) generada en la industria manufacturera de la madera de cedro, mediante su transformación en un material activado. Para determinar la composición del material en términos de humedad, material volátil, carbono fijo y cenizas se usaron métodos termogravimétricos (TGA). El área superficial y la distribución de poro del carbón activado se determinó siguiendo el método BET (ASAP). La morfología y análisis elemental superficial del material se determinó mediante el uso de SEM-EDS. Y para conocer los grupos funcionales activos se utilizó FTIR. El material activado se utilizó para la remoción de dos colorantes industriales (C1 y C2), los cuales generan contaminación del ecosistema acuático. Los resultados experimentales demostraron alta viabilidad para utilizar este material como un adsorbente en aguas con porcentajes de remoción superiores al 90 % y 40 % para los colorantes C1 y C2, respectivamente.

## Removal and recovery of phosphorus using hybrid materials

## Remoción y recuperación de fósforo usando materiales híbridos

A P Ramirez Muñoz<sup>1</sup>, S Giraldo Ardila<sup>1</sup>, E Flórez Yepes<sup>1</sup> and N Acelas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Medellín, Medellín, Colombia

Email: anyipao0804@hotmail.com

**Abstract.** Adsorption is an economical technology and easy to implement in wastewater treatment plants for the removal of contaminants present in wastewater. To find the selective material for each pollutant is the main challenge of the water treatment industry given the necessity to meet with environmental regulations. Phosphorus (P) is one of the essential bioelements for living organisms and is the main constituent of fertilizers. The constant discharge of wastewater with high amount of phosphorus to water sources, is the main cause of eutrophication of the aquatic ecosystems. In this work, an adsorbent material was synthesized, it demonstrated high selectivity towards phosphate, with percentages of removal of 85%. In the same way, during experiments in continuous mode and after 3 cycles of adsorption-regeneration this material did not lose its capacity. With the phosphorus removed it was possible to obtain struvite, which is useful in the fertilizer industry. To know its morphology and elemental composition SEM-EDS was used and the determination of the surface area was made by BET analysis.

**Resumen.** La adsorción es una tecnología económica y de fácil implementación para la remoción de contaminantes presentes en aguas residuales. Encontrar el material selectivo a cada contaminante es el principal desafío de la industria de tratamiento de aguas dada la necesidad de cumplir las regulaciones ambientales. El fósforo (P), es uno de los bioelementos esenciales para los organismos vivos y es el principal constituyente de los fertilizantes. La constante descarga de aguas residuales con alto contenido de fósforo a fuentes de agua, están causando el deterioro de ecosistemas acuáticos por eutrofización. En este trabajo se sintetizó un material adsorbente, el cual demostró alta selectividad hacia fosfato, con porcentajes de remoción del 85%. Del mismo modo, durante los experimentos en continuo y luego de 3 ciclos de adsorción-regeneración este material no perdió su capacidad. Con el fósforo removido fue posible obtener estruvita, útil en la industria de fertilizantes. Para conocer su morfología y composición elemental se utilizó SEM-EDS y la determinación del área superficial se realizó mediante análisis BET.

## Review on the synthesis and characterization of conductive polymer nanowires and their applications

## Resumen sobre la síntesis y caracterización de nanohilos de polímeros conductores y sus aplicaciones

G C Arteaga Aroyo<sup>1</sup>, M A Del Valle de la Cortina<sup>2</sup>, R D Salgado Ordosgoitia<sup>3</sup>, M A Gacitua Santalices<sup>4</sup>, A C Ramos Hernandez<sup>5</sup> and R A Bernal Correa<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Sinú, Cartagena, Colombia

<sup>2</sup> Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, Chile

<sup>3</sup> Corporación Universitaria del Caribe, Sincelejo, Colombia

<sup>4</sup> Universidad Adolfo Ibañez, Santiago de Chile, Chile

<sup>5</sup> Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia

Email: geanarteaga@unisinu.edu.co

**Abstract.** Preparations of electrosynthesized: polythiophene, poly(3,4-ethylenedioxythiophene) PEDOT, poly(1-amino-9,10-anthraquinone-co-o-phenylenediamine), nanowires were prepared employing a mesoporous silica template, which was also electrochemically produced. A cathodic potential step was applied to a fluorine doped tin oxide conducting glass electrode in a cationic surfactant and silicate reagent medium to deposit highly ordered mesoporous silica films. To evaluate the pores order and, consequently, optimal deposition potential, the electrochemical response of the electrodes was studied using ferrocene as redox probe. The modified electrodes were used to accomplish conductin polymers electrodeposits employing 0.6mM monomers and 0.1M tetrabutylammonium hexafluorophosphate in anhydrous CH<sub>3</sub>CN as working solution. Transmission electron microscope images of the deposits revealed the presences of polythiophene, polythiophene, poly(3,4-ethylenedioxythiophene) PEDOT, poly(1-amino-9,10-anthraquinone-co-o-phenylenediamine), nanowires of about 6nm in diameter arranged normal to the electrode surface. The unprecedented small size and arrangement of the obtained nanowires place this work as the study that successfully accomplished the formation of nanoscale electrochemically synthesized conducting polymer nanowires. Has also been used in different applications such as: determination of the different catecholamines, oxidation of formic acid with dispersed Pt nanoparticles.

**Resumen.** Las preparaciones de poli (tiofeno), poli (3,4-etilendioxitiofeno) PEDOT, poli (1-amino-9,10-antraquinona-co-o-fenilendiamina), se prepararon nanohilos empleando una template de sílice mesoporosa, que también se produjo electroquímicamente. Se aplicó una etapa de potencial catódico a un electrodo de vidrio conductor de óxido de estaño dopado con flúor en un tensioactivo catiónico y medio de reactivo de silicato para depositar películas de sílice mesoporosa altamente ordenadas. Para evaluar el orden de los poros y, en consecuencia, el potencial de deposición óptimo, se estudió la respuesta electroquímica de los electrodos utilizando ferroceno como sonda redox. Los electrodos modificados se utilizaron para llevar a cabo electrodepositados de polímeros conductores antes mencionados que emplean: monómeros



0.6mM y hexafluorofosfato de tetrabutilamonio 0.1M en CH<sub>3</sub>CN anhidro como solución de trabajo. Las imágenes de microscopio electrónico de transmisión de los depósitos revelaron la presencia de poliotiofeno, poli (3,4-etilendioxitiofeno) PEDOT, poli (1-amino-9,10-antraquinona-co-o-fenilendiamina), nanohilos de aproximadamente 6nm De diámetro dispuesto perpendicularmente a la superficie del electrodo. El tamaño pequeño y la disposición de los nanohilos obtenidos colocan este trabajo como el estudio que logró con éxito la formación a nanoescala por vía electroquímica la síntesis de nanohilos de polímeros conductores. También se ha utilizado en diferentes aplicaciones como: determinación de las diferentes catecolaminas, oxidación de ácido fórmico con nanopartículas Pt dispersas.

## Spraying of hydroxyapatite biocompatible films by detonation

## Pulverización de películas biocompatibles de hidroxiapatita mediante detonación

P A Tsygankov<sup>1</sup>, A S Skriabin<sup>1</sup>, E Y Loktionov<sup>1</sup>, V D Telekh<sup>1</sup>, R I Chelmodeev<sup>1</sup>, E Méndez Morales<sup>2</sup>, B Fernandez<sup>2</sup> and M Pereyra<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

<sup>2</sup> Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

Email: tsyg@bmstu.ru

**Abstract.** The processes of interaction of accelerated by gas detonation flows of hydroxyapatite powder with a solid and porous surface were studied experimentally. The main features of such dusty flows produced in oxygen-acetylene mixtures were visualized by Schlieren photography. The chemical composition of the gaseous detonation products was analyzed by optical spectroscopy. Typical velocities and pressures of the detonation waves were defined by piezometric sensors. The films prepared on the carbon composite, titanium and tantalum substrates were characterized by EDX, XRD, SEM and FTIR. It was demonstrated that detonation flows with fine hydroxyapatite particles are perspective for spraying of biocompatible films onto the different substrates.

**Resumen.** Se estudiaron experimentalmente los procesos de interacción de los flujos acelerados de detonación de gas de polvo de hidroxiapatita con superficies sólidas y porosas. Las características principales de tales flujos polvorientos producidos en mezclas de oxígeno-acetileno fueron visualizadas por la fotografía de Schlieren. La composición química de los productos de detonación gaseosa se analizó espectroscopia óptica. Las velocidades y presiones típicas de las ondas de detonación fueron definidas por sensores piezométricos. Las películas preparadas sobre los sustratos de compuesto de carbono, titanio y tántalo se caracterizaron por EDX, XRD, SEM y FTIR. Se demostró que los flujos de detonación con partículas finas de hidroxiapatita son perspectivas para la pulverización de películas biocompatibles sobre los diferentes sustratos.

## Structural and magnetic analysis of the $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ system

### Análisis estructural y magnético del sistema $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$

J D Suárez Londoño<sup>1</sup>, A F Cruz Pacheco<sup>2</sup>, C A Parra Vargas<sup>2</sup>, Segura Peña Sully<sup>1</sup>, E H Sachica Castillo<sup>1</sup> and A Sarmiento Santos<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Santo Tomás, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: [juan.suarezl@usantoto.edu.co](mailto:juan.suarezl@usantoto.edu.co)

**Abstract.** This work reports synthesis and characterisation of the  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  (X:0.1, 0.08, 0.07, 0.06, 0.04 y 0.03) systems, produced by the solid-state reaction method. The oxides obtained was characterized by X ray diffraction (XRD), Rietveld refinement and magnetization measures in function of the magnetic field applied and temperature. The structural characterization by Rietveld refinement and XRD allow identification perovskite type structure on all the materials with rhombohedral crystalline system and R3C space group. The characterization by scanning electron microscope (SEM) allow determinate that the sintered solids present a homogenous microstructure. The magnetization curves in function of magnetic field applied between 50 and 300K and in function of the temperature between 500 and 1000Oe of the sintered solids exhibited a ferromagnetic behavior, with a rise of the permanent magnetization ( $M_r$ ), the coercive field ( $H_c$ ) and the magnetic susceptibility when the samarium concentration rise up. The structural and magnetic characteristic that are generated in the obtained solids make these materials to big interest as multiferroic components.

**Resumen.** Este trabajo reporta la síntesis y caracterización de los sistemas  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  (X:0.1, 0.08, 0.07, 0.06, 0.04 y 0.03), obtenidos por el método de reacción de estado sólido. Los óxidos obtenidos se caracterizaron por difracción de rayos X (DRX), refinamiento Rietveld y medidas de magnetización en función del campo magnético aplicado y de la temperatura. La caracterización estructural por DRX y refinamiento Rietveld permite identificar estructuras tipo perovskita en todos los materiales con sistema cristalino romboédrico y grupo espacial R3C. La caracterización por microscopia electrónica de barrido (MEB) permite determinar que los sólidos sintetizados presentan una microestructura homogénea. Las curvas de magnetización en función del campo magnético aplicado entre 50 y 300K y en función de la temperatura entre 500 y 1000Oe de los sólidos sintetizados exhibieron un comportamiento ferromagnético, con aumento de la magnetización remanente ( $M_r$ ), el campo coercitivo ( $H_c$ ) y la susceptibilidad magnética cuando se aumenta la concentración de Samario. Las características estructurales y magnéticas que se generan en los sólidos obtenidos hacen a estos materiales de gran interés como componentes multiferroicos.

# Structural and magnetic analysis of the Pr<sub>1.5</sub>Eu<sub>1.5</sub>Ba<sub>5</sub>Cu<sub>8</sub>O<sub>18</sub> System

## Análisis estructural y magnético del sistema Pr<sub>1.5</sub>Eu<sub>1.5</sub>Ba<sub>5</sub>Cu<sub>8</sub>O<sub>18</sub>

J A Parra Borda<sup>1</sup>, A F Cruz Pacheco<sup>2</sup>, C A Parra Vargas<sup>2</sup>, F G Rojas Cruz<sup>1</sup> and S Segura Peña<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Santo Tomás, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: julian.parrab@usantoto.edu.co

**Abstract.** This work describes the synthesis and characterization of the Pr<sub>1.5</sub>Eu<sub>1.5</sub>Ba<sub>5</sub>Cu<sub>8</sub>O<sub>18</sub>, system obtained by the solid-state reaction method. High purity oxides (99.99%) are used for the synthesis of solids. The sintering temperature was 900°C. The structural characterization of the synthesized systems was carried out using X-ray diffraction (XRD), making a comparison with standards obtained in the literature and corroborated with Rietveld refinement analysis, obtaining orthorhombic crystal type Pnm2 with a=3.8960Å, b=3.8890Å, c=31.1500Å. The morphology and microstructure of the materials was determined with the images obtained by scanning electron microscopy (SEM). Finally, the magnetic analyzes were carried out on a VersaLab magnetometer using the magnetization curves as a function of the applied magnetic field (50-300K) and the temperature (500-5000Oe), determining the behavior of the materials after of sintered and oxygenated processes.

**Resumen.** Este trabajo describe la síntesis y caracterización del sistema Pr<sub>1.5</sub>Eu<sub>1.5</sub>Ba<sub>5</sub>Cu<sub>8</sub>O<sub>18</sub>, obtenidos por el método de reacción de estado sólido. En la síntesis de los sólidos se utilizaron óxidos precursores de alta pureza (99.99 %) y una temperatura de sinterización de 900°C. La caracterización estructural de los sistemas sintetizados se llevó a cabo mediante difracción de rayos X (DRX) realizando una comparación con patrones obtenidos en la literatura y corroborados con análisis de refinamiento Rietveld, obteniendo sistemas cristalinos ortorrómbico tipo Pmm2 con a=3.8960Å, b=3.8890Å, c=31.1500Å. La morfología y microestructura de los materiales fue determinada con las imágenes obtenidas por microscopía electrónica de barrido (MEB). Por último, los análisis magnéticos se llevaron a cabo en un magnetómetro VersaLab mediante las curvas de magnetización en función del campo magnético aplicado (50-300K) y de la temperatura (500–5000Oe), determinando el comportamiento que toman los materiales después de los procesos de sinterizado y oxigenado.

## Structural and mechanical study of concrete made from cementitious materials of low environmental impact

## Análisis estructural y mecánico de concretos elaborados a partir de materiales cementantes de bajo impacto ambiental

C P González Cuervo<sup>1</sup>, A Santos<sup>1</sup>, A K González Cardenas<sup>2</sup> and A M Montaña Angarita<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: claudia.gonzalez@upb.edu.co

**Abstract.** This work shows the results obtained by replace Type I Portland®, by cementitious geopolymeric materials, derived from minerals, in concrete mixtures. Synthesis of both geopolymers was made by alkaline activation of two aluminosilicates; Bentonite and Pumice. Alkaline agents used were sodium hydroxide (NaOH) and sodium silicate (Na<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>). Geopolymers obtained were structurally studied by XRD, SEM and XRDE. Concrete mixtures were prepared by replacement of Portland with 10% and 30 % of geopolymer. Finally, concrete mortars formed were mechanically analyzed according to ICONTEC 220 a 7, 14, 28, 41, 90 and 120 days of cure. Results shows that compressive strength of concrete from Bentonite and Pumice are almost the same for the standard concrete at 28 days of cure. At 90 days of cure, compression resistance of concrete from Pumice at 10%, is even higher than those for standard concrete.

**Resumen.** En este trabajo se presentan los resultados obtenidos al reemplazar cemento Portland Tipo I®, por materiales cementantes geopoliméricos derivados de fases minerales, en mezclas de concreto. La síntesis de dos geopolímeros se realizó a partir de la activación alcalina de los aluminosilicatos: Bentonita y Piedra pómez. Los agentes alcalinos empleados para la geopolimerización, fueron Hidróxido de Sodio (NaOH) y Silicato de Sodio (Na<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>). Los geopolímeros obtenidos, fueron caracterizados estructuralmente por las técnicas experimentales: difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de barrido (SEM) y espectroscopia de energía dispersiva de rayos X (EDS). Posteriormente, se prepararon mezclas de concreto, en las que cada geopolímero, se adicionó como sustituyente del cemento Portland Tipo I ® en porcentajes de 10% y 30%. Finalmente, las probetas de concreto obtenidas se analizaron mecánicamente, de acuerdo a la norma ICONTEC 220 a 7, 14, 28, 41, 90 y 120 días de curado. Los resultados obtenidos fueron comparados con las mezclas del patrón (concreto sin reemplazo de cemento Portland), encontrando que la resistencia del concreto derivado de Bentonita y Piedra Pómez es prácticamente igual a la del cemento convencional a los 28 días de curado. A los 90 días de curado la resistencia del concreto de Piedra Pómez supera la del cemento convencional.

## Structural, electrical, and magnetic properties in the system $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_3$

## Propiedades estructurales, eléctricas y magnéticas en el sistema $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_3$

C A Estrada Rodriguez<sup>1</sup>, J L Pimentel Junior<sup>2</sup> and C A Parra Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brazil

Email: caer8123@hotmail.com

**Abstract.** The structural, magnetic and electrical properties of the system  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_3$ , produced by the conventional method of the solid state reaction are reported. The analysis of X- rays diffraction, allow to infer that the compound crystallizes in a monoclinic system of space group  $C2/m$  with network parameters:  $a=5.558\text{\AA}$ ,  $b=4.873\text{\AA}$  and  $c=2.858\text{\AA}$ . Below the temperature of Neel ( $T\cong 40\text{K}$ ) the system exhibits antiferromagnetic order (AFM), while above it follows the law of Curie-Weiss in the paramagnetic region between 66 and 161K. In the paramagnetic region was determined an effective magnetic moment of 5,601 magnetons of bohr, this indicates a high spin configuration for the  $\text{Co}^{2+}$  ion ( $S=3/2$ ) in the fundamental state  $4T_{1g}$  (electronic configuration  $t_{2g}^5 e_g^2$ ). The resistivity measurements show the presence of metal-insulating transition at two temperatures, the first around 170K, and the second at low temperature near 40K. Finally, the insulation behavior observed between the metal states is associated with a possible Loading order.

**Resumen.** Se reportan las propiedades estructurales, magnéticas y eléctricas del sistema  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_3$ , producido por el método convencional de reacción de estado sólido. Los análisis de difracción de rayos X, permiten inferir que el compuesto cristaliza en un sistema monoclinico de grupo espacial  $C2/m$  con parámetros de red:  $a=5.558\text{\AA}$ ,  $b=4.873\text{\AA}$  y  $c=2.858\text{\AA}$ . Por debajo de la temperatura de Néel ( $T\cong 40\text{K}$ ) el sistema exhibe orden antiferromagnético (AFM), mientras que por encima sigue la ley de Curie-Weiss en la región paramagnética comprendida entre 66 y 161K. En la región paramagnética, se determinó un momento magnético efectivo de 5.601 magnetones de bohr, esto indica una alta configuración de spin para el ion  $\text{Co}^{2+}$  ( $S=3/2$ ) en estado fundamental  $4T_{1g}$  (configuración electrónica  $t_{2g}^5 e_g^2$ ). Las medidas de resistividad permiten evidenciar la presencia de transición metal-aislante en dos temperaturas, la primera alrededor de 170K, y la segunda a baja temperatura cerca a 40K. Finalmente, el comportamiento aislante observado entre los estados metálicos es asociado a un posible orden de carga.

# Structural, mechanical and electronic properties of two-dimensional honeycomb structure of group III-arsenide binary compounds: An ab-initio study

## Estudio ab-initio de las propiedades estructurales, mecánicas y electrónicas de la estructura tipo panel de abeja de los compuestos binarios del grupo III-As

A González García<sup>1</sup>, W López-Pérez<sup>1</sup>, C Pinilla<sup>1</sup> and R González-Hernández<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia

Email: gonzalezaf@uninorte.edu.co

**Abstract.** Structural, mechanical and electronic properties of 2D-dimensional honeycomb structure of group IIAs binary compounds (III=B, Al, Ga, In) have been studied by first-principles calculations based on density functional theory (DFT). Results display that 2D-BAs is found to be a stable structure for a planar geometry; while 2D-AlAs, GaAs and InAs, are for a low-buckled geometry. In addition, bond length (cohesive energy) increases (decreases) from 2D-BAs to 2D-InAs in the present study. The calculation of elastic constants shows that the Young's modulus, bulk modulus and shear modulus decrease for 2D-IIAs binary compounds as we move down on the group of elements of the periodic table. It is found that BAs is ~250% (400%) times stiffer along the in-plane direction than both AlAs and GaAs (InAs). This can be explained by bonding features. Bond length is inversely proportional to bond strength. On the contrary, we find that the Poisson's ratio increases with increasing row number of elements. It means, as we move down on the group of elements, the 2D-IIAs binary compounds display less stiffness and more plasticity. Regarding the electronic properties, the semiconducting nature of the 3D-IIAs compounds is retained by their 2D counterpart. BAs (GaAs) changes from GD\_min indirect (GG direct) to KK direct (GK indirect) band gap. In addition, InAs maintains its GG direct band gap, while AlAs changes from GX indirect to GK indirect. Since graphene was isolated, the search for new 2D candidates has increased. Metallic 2D candidates are less likely to be stable due to their high reactivity. Therefore, semiconducting 2D crystals, such as 2D III-As, are promising materials for the design of new electronic and optoelectronic devices. This study also provides relevant physical knowledge for further theoretical and experimental studies.

**Resumen.** A través de cálculos de primeros principios basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) se estudió la estructura bidimensional tipo panel de abeja de los compuestos binarios del grupo IIAs (III=B, Al, Ga, In). Los resultados muestran que 2D-BAs es estable para una geometría plana; mientras que 2D-AlAs, GaAs y InAs, lo son para una geometría no plana. Además, la longitud de enlace (energía de cohesión) aumenta (disminuye) de 2D-BAs a 2D-InAs en el presente estudio. El cálculo de las constantes elásticas muestra que el módulo de Young, el módulo de volumen y el módulo de rigidez disminuyen al moverse del BAs al InAs en la tabla periódica. Se encontró que BAs es ~250% (400%) más rígido en la dirección de plano que AlAs

y GaAs (InAs). Esto puede explicarse por las características del enlace. La longitud de enlace es inversamente proporcional a la intensidad del mismo. Por el contrario, encontramos que la relación de Poisson incrementa al aumentar el número de filas en los elementos de la tabla periódica. Es decir, a medida que nos movemos hacia abajo en el grupo de los elementos, los compuestos 2D-IIIAs presentan menos rigidez y más plasticidad. Con respecto a las propiedades electrónicas, los compuestos 2D IIIAs mantienen la naturaleza semiconductor de su contratarte 3D-IIIAs. BAs (GaAs) cambia de semiconductor indirecto tipo GD\_min (directo GG) a directo KK (indirecto GK). Además, InAs se mantiene semiconductor directo tipo GG; mientras que AlAs cambia de indirecto tipo GX a indirecto GK. Desde que el grafeno fue aislado experimentalmente, la búsqueda de nuevos materiales 2D se ha incrementado. Los materiales metálicos 2D tienen menos probabilidad de ser estables debido a que son muy reactivos. Por lo tanto, cristales semiconductores 2D, tales como 2D III-As, son materiales prometedores para el diseño de nuevos dispositivos electrónicos y opto-electrónicos. Este estudio provee además conocimiento físico relevante para estudios posteriores tanto teóricos como experimentales.



## Structural properties of $\text{La}_{3,5-x}\text{Ba}_{4.5+x-y}\text{Ca}_y\text{Cu}_8\text{O}_{18}$ system (0.2)

### Propiedades estructurales del sistema $\text{La}_{3,5-x}\text{Ba}_{4.5+x-y}\text{Ca}_y\text{Cu}_8\text{O}_{18}$ (0.2)

L A Pérez Díaz<sup>1</sup>, A F Cruz Pacheco<sup>1</sup>, J A Góme<sup>1</sup> and C A Parra Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: linda.perez@uptc.edu.co

**Abstract.** This work describes the synthesis and characterization of the  $\text{La}_{3,5-x}\text{Ba}_{4.5+x-y}\text{Ca}_y\text{Cu}_8\text{O}_{18}$  system synthesized by the conventional solid-state reaction method, based on the synthesis of samples that are in the pure phase range proposed by West. The samples were characterized X-ray diffraction (XRD) and Rietveld refinement. The samples were produced starting from the oxides of  $\text{La}_2\text{O}_3$  (99,99%),  $\text{CuO}$  (99,999%) and carbonates of  $\text{BaCO}_3$  (99,999%) and  $\text{CaCO}_3$  (99,999%). The calcination temperature was  $780^\circ\text{C}$  for 24 hours. The sintering and oxygenation process was at  $850^\circ\text{C}$  for 24 hours in order to obtain the formation of the final structure of the system. With the data obtained, a comparison was made between these and a theoretical pattern 358 with the help of the PCW program, allowing the determination of the characteristic diffraction peaks of these solids. The structural analysis was carried out using XRD and Rietveld refinement, analyzes that allowed to determine that the system presents orthorhombic structure with parameters of  $a=3.845\text{\AA}$ ,  $b=3.894\text{\AA}$  y  $c=31.093\text{\AA}$ , unit cell volume  $V=465.537\text{\AA}^3$  and a space group  $\text{Pmm}2$  (358). The above results demonstrate the possibility of obtaining pure phases of this materials in an ordered atomic arrangement that is in agreement with the expected characteristics for this type of structures predicted by modelling processes.

**Resumen.** Este trabajo describe la síntesis y caracterización del sistema  $\text{La}_{3,5-x}\text{Ba}_{4.5+x-y}\text{Ca}_y\text{Cu}_8\text{O}_{18}$  sintetizado por el método convencional de reacción de estado sólido, basado en la síntesis de muestras que se encuentran en el rango de fase pura propuesta por West. Las muestras fueron caracterizadas por difracción de rayos X (XRD) y refinamiento Rietveld. Las muestras fueron producidas partiendo de los óxidos de  $\text{La}_2\text{O}_3$  (99,99%),  $\text{CuO}$  (99,999%) y carbonatos de  $\text{BaCO}_3$  (99,999%) y  $\text{CaCO}_3$  (99,999%). La temperatura de calcinado fue de  $780^\circ\text{C}$  durante 24 horas. El proceso de sinterizado y oxigenado se hizo a  $850^\circ\text{C}$  durante 24 horas esto con el fin de obtener la formación de la estructura final del sistema. Con los datos obtenidos se realizó la comparación entre estos y un patrón teórico 358 con la ayuda del programa PCW permitiendo determinar los picos de difracción característicos de estos sólidos. El análisis estructural se llevó a cabo mediante DRX y refinamiento Rietveld, análisis que permitieron determinar que el sistema presenta una estructura ortorrómbica con parámetros de  $a=3.845\text{\AA}$ ,  $b=3.894\text{\AA}$  y  $c=31.093\text{\AA}$ , volumen de celda unidad  $V=465.537\text{\AA}^3$  y un grupo espacial  $\text{Pmm}2$  (358). Los anteriores resultados demuestran la posibilidad de obtener fases puras de este material en un arreglo atómico ordenado que está en concordancia con las características esperadas para este tipo de estructuras predichas por procesos de modelamiento.

## Study of electronic properties of hexagonal $\text{Mo}_{0.50}\text{W}_{0.50}\text{N}_2$ monolayer

## Estudio de las propiedades electrónicas de la monocapa hexagonal $\text{Mo}_{0.50}\text{W}_{0.50}\text{N}_2$

C Ortega López<sup>1</sup>, N De la Espriella Vélez<sup>1</sup> and G R Casiano Jiménez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

Email: cesarorlo@gmail.com

**Abstract.** In this work, calculations of first principles are reported to investigate the structural and electronic properties of the two-dimensional hexagonal  $\text{Mo}_{0.50}\text{W}_{0.50}\text{N}_2$  compound, in a  $4 \times 4$  geometry. Calculations are performed using the pseudopotential method, as implemented in the Quantum-ESPRESSO package. For the electron-electron description, the generalized gradient approximation (GGA-PBE) is used. The monolayer is modeled using the supercell or periodic slab scheme with a vacuum region of 18Å. It is found that the value of the lattice constant of 2.97Å satisfies Beghard's law and no significant changes occur in the phase and geometry of the monolayer. From the analysis of the density of states (DOS), it is established that the monolayer presents metallic and magnetic behavior: with a value of the total magnetic moment of  $M_t=21.71\mu\text{B}/\text{super cell}$ .

**Resumen.** En este trabajo, se reportan cálculos de primeros principios para investigar las propiedades estructurales y electrónicas del compuesto bidimensional hexagonal  $\text{Mo}_{0.50}\text{W}_{0.50}\text{N}_2$ , en una geometría  $4 \times 4$ . Los cálculos se realizan utilizando el método del pseudopotencial, como está implementado en el paquete Quantum-ESPRESSO. Para la descripción electrón-electrón, se emplea la aproximación de gradiente generalizado (GGA-PBE). La monocapa se modela usando el esquema de la supercelda o slab periodico, con una región de vacío de 18Å. Se encuentra que el valor de la contante de red es 2.97Å, el cual satisface la ley de Beghard, y que no ocurren cambios significativos en la fase y geometría de la monocapa. Del análisis de la densidad de estados (DOS), se establece que la monocapa presenta comportamiento metálico y magnético: con un valor del momento magnético total  $M_t=21.71\mu\text{B}/\text{super celda}$ .

## **Study of structural properties of paracetamol, interacting with calcium lignosulphonates, in different environments, for the treatment of pharmacologically contaminated waste water**

## **Estudio de las propiedades estructurales del paracetamol, interactuando con lignosulfonados con calcio, en diferentes medios, para el tratamiento de aguas residuales farmacológicamente contaminadas**

**M M Falla Solorzano<sup>1</sup>, L E Bolívar Martínez<sup>1</sup> and P J Salazar Valencia<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad del Cauca, Popayán, Colombia

Email: [mfalla@unicauca.edu.co](mailto:mfalla@unicauca.edu.co)

**Abstract.** A basic and pressing need in the treatment of residual waters of urban and rural centers is the removal of Pharmacological Active Residues (PAR) originated in a wide array of domestic, agricultural and industrial sources. This residue cannot be removed by conventional methods and incorporate themselves into the ecosystem altering the physiology and behavior of living beings. Among the most active pharmacological substances found in high concentration in residual waters (due to their excessive use, ease of access and low cost) are analgesics such as paracetamol, that is not entirely absorbed by the human organism and therefore is excreted via urinary tract. In this work, we have used the PM3 (Parametric Method 3) to study and observe the structural properties of paracetamol while immersed in different basic and acidic aqueous environments interacting with calcium lignosulphonates. We have previously found that this lignin derivative, obtained as a byproduct of the wood pulping process and of wide industrial availability can be engineered to act as binding and flocculant agent, performing a role as catcher and filter suitable for catching molecular residues in residual waters.

**Resumen.** Una necesidad básica y urgente en el tratamiento de aguas residuales de centros urbanos y rurales es la eliminación de residuos farmacológicos activos (PAR) originados en una amplia gama de fuentes domésticas, agrícolas e industriales. Estos residuos no pueden eliminarse por métodos convencionales e incorporarse al ecosistema alterando la fisiología y el comportamiento de los seres vivos. Entre las sustancias farmacológicas más activas encontradas en alta concentración en aguas residuales (debido a su uso excesivo, facilidad de acceso y bajo costo) se encuentran analgésicos como el paracetamol, que no es absorbido por el organismo humano y por lo tanto es excretado vía tracto urinario. En este trabajo hemos utilizado el PM3 (Parametric Method 3) para estudiar y observar las propiedades estructurales del paracetamol, inmerso en diferentes ambientes acuosos básicos y ácidos interactuando con lignosulfonados con calcio. Anteriormente habíamos encontrado que este derivado de la lignina, obtenido como un subproducto del proceso de extracción de la pulpa de papel en la industria de los derivados de la madera, y de amplia disponibilidad industrial, puede ser diseñado para actuar como agente

aglutinante y floculante, desempeñando un papel como captador y filtro adecuado para capturar residuos moleculares en aguas residuales.

## Substitution of carbon atoms in a graphene-like monolayer of AlN. Etudy of electronic and magnetic properties

## Sustitución de átomos de carbono en la monocapa de AlN tipo grafeno. Estudio de propiedades electrónicas y magnéticas

J F Murillo Garcia<sup>1</sup>, J A Rodríguez Martínez<sup>2</sup> and C Ortega López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: juanfmg1973@gmail.com

**Abstract.** Within the framework of the DFT the effects of substitution of carbon atoms in the like-graphene AlN monolayer using the pseudopotential method were investigated. The generalized gradient approximation (GGA) with the Perdew-Burke-Emzerhof scheme (PBE) is implemented to optimize the geometry structure. The substitution of nitrogen by carbon atom causes a reorientation of the N-Al-N bonds in the monolayer of approximately 5 degrees. A relative reduction of about 0.011Å in the interatomic distance Al-N is observed. The substitutions of N by C change the semiconductor character of the AlN monolayer by a semimetal behavior, generated by the 2p orbitals of C atom penetration through Fermi barrier. In sustitution processe is induced a magnetism of 2μB.

**Resumen.** Fueron investigados, en el marco de la DFT, los efectos de la sustitución de átomos de carbono en la monocapa AlN tipo grafeno, usando el método del pseudopotencial. Se implementó la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) con el esquema de Perdew-Burke-Emzerhof para optimizar la geometría de la estructura. La sustitución de nitrógeno por átomos de carbono genera una reorientación de los enlaces N-Al-N en la monocapa de aproximadamente 5 grados. Se observó una reducción relativa en la distancia interatómica Al-N de alrededor de 0.011Å. Las sustituciones de N por C cambian el carácter semiconductor de la monocapa de AlN por un comportamiento semimetal, generado por penetración de los orbitales 2p de los átomos de C a través de la barrera de Fermi. En el proceso de sustitución se induce un magnetismo de 2μB.

## Synthesis and characterization of the Pr<sub>2.5</sub>Eu<sub>0.5</sub>Ba<sub>5</sub>Cu<sub>8</sub>O<sub>18</sub>

## Síntesis y caracterización del sistema Pr<sub>2.5</sub>Eu<sub>0.5</sub>Ba<sub>5</sub>Cu<sub>8</sub>O<sub>18</sub>

F G Rojas Cruz<sup>1</sup>, A F Cruz Pacheco<sup>2</sup>, C A Parra Vargas<sup>2</sup>, J A Parra Borda<sup>1</sup> and S Segura Peña<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Santo Tomás, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: fredy.rojasc@usantoto.edu.co

**Abstract.** This research describes the synthesis and characterization of the Pr<sub>2.5</sub>Eu<sub>0.5</sub>Ba<sub>5</sub>Cu<sub>8</sub>O<sub>18</sub> system, obtained by the solid-state reaction method. For the synthesis of this material, oxides of Pr<sub>6</sub>O<sub>11</sub>, Eu<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, BaO and CuO were used with (99.99%) purities. The sintering temperature was 900°C. The structural analysis of the synthesized systems was carried out using X-ray diffraction (XRD), with a comparison with theoretical patterns and corroborated with Rietveld refinement analysis, obtaining a crystallographic orthorhombic system type Pmm2 with a=b=3.8931Å, c=31.1425Å. The characterization by scanning electronic microscopy (SEM) allowed to determine that the material presents homogeneous granular morphology. Finally, the magnetic response of this material is determined by the magnetization curves as a function of the applied magnetic field (50-300K) and as a function of temperature (500-5000Oe).

**Resumen.** Esta investigación describe la síntesis y caracterización del sistema Pr<sub>2.5</sub>Eu<sub>0.5</sub>Ba<sub>5</sub>Cu<sub>8</sub>O<sub>18</sub>, obtenidos por el método de reacción de estado sólido. Para la síntesis de este material se utilizaron óxidos de Pr<sub>6</sub>O<sub>11</sub>, Eu<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, BaO y CuO con purezas del (99.99 %). La temperatura de sinterización fue de 900°C. El análisis estructural de los sistemas sintetizados se llevó a cabo mediante difracción de rayos X (DRX) realizando una comparación con patrones teóricos y corroborados con análisis de refinamiento Rietveld, obteniendo un sistema cristalino ortorrómbico tipo Pmm2 con a=b=3.8931Å, c=31.1425Å. La caracterización por microscopía electrónica de barrido (MEB) permitió determinar que el material presenta morfología granular homogénea. Finalmente, la respuesta magnética de este material es determinada por las curvas de magnetización en función del campo magnético aplicado (50-300K) y en función de la temperatura (500 – 5000Oe).

## Use of steel slag as a new material for roads

## Utilización de escoria siderúrgica como nuevo material para vías

M A Romero Farfán<sup>1</sup>, J E Cárdenas Lancheros<sup>1</sup>, J A Forero González<sup>1</sup> and R Ochoa Díaz<sup>1</sup>  
<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: miguel.romero@uptc.edu.co

**Abstract.** The design of asphalt concrete made of steel slag constitutes an alternative for using this material to mitigate environmental effects and favor the use of non-conventional material, specifically in asphalt concrete manufacturing. Slag is a metal smelting byproduct classified as dross and retired at the moment of steel manufacturing. This way, the current research sets out the analysis of the mechanic and dynamic behavior of asphalt concrete MDC-19 made of phosphoric slag and blast furnace dust as addition, with the use of asphalt 80-100 and the RAMCODES methodology for its design. First of all, the used materials are characterized; then, the obtained results are analyzed, and the work formulas are established for the proposed mixtures; finally, the stability and concrete flow criteria are verified to make its dynamic characterization with the plastic deformation resistance test by means of the laboratory test track and the determination of the resilient modules with the NAT (Nottingham Asphalt Tester) team. From the results, it was concluded that phosphoric slag improved the asphalt concrete stability for a NT3 transit level, with lower deformability, but without higher affectation in the resilient module.

**Resumen.** El diseño de mezclas asfálticas con residuos siderúrgicos se constituye en una alternativa para la utilización de estos desechos, con el fin de mitigar efectos ambientales y propiciar el uso de materiales no convencionales, específicamente en la fabricación de mezclas asfálticas. Las escorias son un subproducto de la fundición de metal, clasificadas como impurezas y retiradas al momento de fabricación del acero. De esta manera, la presente investigación plantea el análisis del comportamiento mecánico y dinámico de mezclas asfálticas MDC-19, elaboradas con escoria fosfórica y polvo de alto horno como agregados, con la utilización de asfalto 80-100 y el uso de la metodología RAMCODES para su diseño. Inicialmente, se realiza la caracterización de los materiales usados; en seguida, se analizan los resultados obtenidos y se establecen las fórmulas de trabajo para las mezclas propuestas y, finalmente, se verifican los criterios de estabilidad y flujo de las mezclas y se realiza su caracterización dinámica, con el ensayo de resistencia a la deformación plástica mediante la pista de ensayo de laboratorio y la determinación de módulos resilientes con el equipo NAT (Nottingham Asphalt Tester). Dentro de los resultados, se concluyó que la escoria fosfórica mejoró la estabilidad de las mezclas asfálticas para un nivel de tránsito NT3, con una menor deformabilidad, pero sin mayor afectación en el módulo resiliente.

# Hydrothermal synthesis of a photovoltaic material based on $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Se}_2$

## Síntesis hidrotérmica de un material fotovoltaico basado en $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Se}_2$

Y T Castellanos Báez<sup>1</sup>, D A Fuquen-Peña<sup>1</sup>, J A Gómez-Cuaspad<sup>1</sup>, E Vera-López<sup>1</sup> and Y Pineda-Triana<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: yeimy.castellanos01@uptc.edu.co

**Abstract.** The present work reports the synthesis and characterization of  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Se}_2$  system (Abbreviated CIGS), by a hydrothermal method, in order to obtain a solid with surface, morphological and texture properties for application in the design of photovoltaic cells. The synthesis of solid was performed using the corresponding copper, indium, gallium and selenium nitrates in stoichiometric ratio 1:0.5:0.5:2, which were treated under stirring conditions (200rpm) for 72 hours at 300°C and a pressure of 8.5Mpa. The obtained material was characterized by X-ray diffraction (XRD), ultraviolet spectroscopy (UV), Raman microscopy and scanning electron microscopy (SEM) techniques. The results of the structural characterization of the solid using a PANalytical X'Pert PRO-MPD equipment, with Pixel detector between 10 and 90°, allowed to confirm the obtention of a chalcopyrite structure, with a tetragonal crystalline system oriented along the (1 1 2) facet. The network parameters obtained, were adjusted to values of  $a=5.61\text{Å}$  and  $c=11.02\text{Å}$ , which are distinguished from the sphalerite phase, due to the fact that it presents weak signals corresponding to the (1 0 1) and (2 1 1) facets. It was determined that the increase in the synthesis temperature has an effect on the intensity of the diffraction signals, which gradually increase along with the estimated crystallite size. The results of the characterization by ultraviolet spectroscopy (UV), showed that synthesized material has a band-gap around 1.35eV, value next to the one reported theoretically, which confirms the effectiveness of the synthesis process. The results of Raman microscopy demonstrate the presence of the main vibrational signals associated with the  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Se}_2$  material, simultaneously demonstrating the success in the conformation of the phase with two main vibrational signals around 173 and 177 $\text{cm}^{-1}$ . The main vibrational modes found and categorized as A1, associated to the CIGS material, show a slight variation at high frequencies (compared to the theoretical value reported for  $\text{CuInSe}_2$ ), indicating that the presence of gallium in the material can generate a signal with greater intensity in the region of 155 $\text{cm}^{-1}$ , which has been identified with principal vibrational modes characteristic of copper-poor phases. The morphology was analyzed using scanning electron microscopy (SEM) (using a reference equipment CARL EVO MA10), which showed a series of morphological and surface characteristics consistent with a homogeneous solid with agglomerates around 20-100 $\mu\text{m}$ . These results are consistent with those obtained by other synthesis pathways related with chemical vapor deposition (CVD) and solid state reaction, concluding that the results obtained from the hydrothermal route for CIGS synthesis, presented excellent results in the production of semiconductor materials with potential applications.



**Resumen.** El presente trabajo, reporta la síntesis y caracterización del sistema  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Se}_2$  (abreviadamente CIGS), mediante la implementación de un método hidrotérmico, con el fin de obtener un sólido con propiedades superficiales, morfológicas y de textura apropiadas para aplicación en el diseño de celdas fotovoltaicas. La síntesis del material se realizó utilizando los correspondientes nitratos de cobre, índio, galio y selenio en proporción estequiométrica 1:0.5:0.5:2, los cuales fueron tratados bajo condiciones de agitación constante (200rpm) por 72 horas a  $300^\circ\text{C}$  y una presión autosostenida de 8.5Mpa. El material obtenido se caracterizó mediante técnicas de difracción de rayos X (XRD), espectroscopía ultravioleta (UV), microscopía Raman y microscopía electrónica de barrido (SEM). Los resultados de la caracterización estructural del sólido utilizando un equipo X'Pert PRO-MPD PANalytical, con detector Pixel entre  $10$  y  $90^\circ$ , permitió confirmar la obtención de una estructura tipo calcopirita, con un sistema cristalino tetragonal orientado preferentemente a lo largo del plano (1 1 2). Los parámetros de red obtenidos, se ajustaron a valores de  $a=5.61\text{\AA}$  y  $c=11.02\text{\AA}$ , que se distinguen de la fase esfalerita, debido a que presenta señales débiles correspondientes con los planos (1 0 1) y (2 1 1). Se determinó que el aumento de la temperatura de síntesis tiene un efecto sobre la intensidad de las señales de difracción, las cuales aumentan gradualmente junto con el valor estimado del tamaño de cristalito. Los resultados de la caracterización por espectroscopía ultravioleta (UV), demostraron que el material sintetizado tiene un Band-gap alrededor de los 1.35eV, valor próximo al reportado teóricamente, lo que confirma la efectividad del proceso de síntesis. Los resultados de microscopía Raman, demuestran la presencia de las principales señales vibracionales asociadas al material  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{Se}_2$ , demostrando de forma simultánea el éxito en la conformación de la fase buscada con dos señales vibracionales principales alrededor de los  $173$  y  $177\text{cm}^{-1}$ . Los principales modos vibracionales encontrados y categorizados como A1, asociados al material CIGS, muestran una ligera variación a altas frecuencias (comparado con el valor teórico reportado para el  $\text{CuInSe}_2$ ), indicando que la presencia del galio en el material puede generar una señal con mayor intensidad en la región de  $155\text{cm}^{-1}$ , lo cual ha sido identificado con modos vibracionales principales característicos de fases pobres en cobre. La morfología del material se analizó usando microscopía electrónica de barrido (SEM) (utilizando un equipo de referencia CARL EVO MA10), la cual evidenció una serie de características morfológicas y de superficie consistentes con un sólido homogéneo con aglomerados alrededor de  $20\text{-}100\mu\text{m}$ . Dichos resultados son consistentes con los obtenidos por otras rutas de síntesis relacionadas con vías de reacción por plasma (CVD) y estado sólido, concluyendo que los resultados obtenidos de la ruta hidrotérmica para la síntesis de CIGS, presentó óptimos resultados en la obtención de materiales semiconductores con potenciales aplicaciones.

## **Plasma Applications and Technologies – PAT**

## **Aplicaciones del Plasma y Tecnologías - PAT**

## Effect of surface preparation on the adhesive-cohesive strenght of coatings applied by atmospheric plasma spray onto stainless steel

## Efecto de la preparación superficial sobre la resistencia adhesiva-cohesiva de recubrimientos aplicados por plasma atmosférico sobre sustratos de acero inoxidable

S Sanchez Gómez<sup>1</sup>, A Toro Betancur<sup>2</sup>, I M Zuluaga Buriticá<sup>2</sup>, M Ramos<sup>1</sup> and L Olmos Villalba<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

Email: seb.sanchez@pascualbravo.edu.co

**Abstract.** In this paper, the effect of surface preparation on metal substrates (stainless steels AISI 304 and ASTM Grade CA6NM) was evaluated using sandblasting and machining over the adhesive-cohesive strength of coatings applied by Atmospheric Plasma Spray (APS). Commercial materials were used for the Bond Coat (BC) like Ni-Al and the adhesive-cohesive strength measurements were carried out according to ASTM C633. The results showed that there is a significant effect on the adhesive-cohesive strength when the two methods, sandblasting and machining was combined. On the other hand, there were no representative differences between the responses obtained for the two different substrates studied.

**Resumen.** En el presente trabajo se evaluó el efecto de la preparación superficial de sustratos metálicos con chorro de arena (sandblasting SB) y mediante el uso de herramientas de corte (HC) sobre la resistencia adhesivo-cohesiva de recubrimientos aplicados mediante aspersión por plasma atmosférico (APS) sobre aceros inoxidables AISI 304 y ASTM Grado CA6NM. Se utilizaron materiales comerciales de aporte en polvo de Ni-Al para la capa de anclaje (Bond Coat BC) y las mediciones de resistencia adhesivo-cohesiva se llevaron a cabo de acuerdo a la norma ASTM C633. Los resultados mostraron que existe un efecto significativo sobre la respuesta adhesivo-cohesiva del sistema sustrato-recubrimiento cuando los 2 métodos de preparación superficial se combinan. Por otro lado, no hubo diferencias estadísticamente representativas entre las respuestas obtenidas para los 2 diferentes sustratos estudiados.

## Effect of the frequency on the structure of TiO<sub>2</sub> coatings growth by plasma electrolytic oxidation

## Efecto de la frecuencia sobre la estructura de recubrimientos de TiO<sub>2</sub> por oxidación electrolítica con plasma

D A Torres Cerón<sup>1</sup>, S N Moya Betancourt<sup>1</sup> and F Gordillo Delgado<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Quindío, Armenia, Colombia

Email: datorresc@uqvirtual.edu.co

**Abstract.** Plasma electrolytic oxidation (PEO) is a technique used to generate with the appropriate selection of an electrolyte, titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) ceramic coatings. The micro-cavities dimension and the particle size at the surface can be controlled through the pulse frequency of the voltage that is applied between the electrodes. The change of surface morphology can increase the surface area to volume ratio, which is important for enhancing the efficiency of the heterogeneous photocatalysis process with TiO<sub>2</sub> as an alternative method of wastewater treatment. In this work, PEO of an ASME SB-265 titanium substrate (20x20x0.1mm) was done in a water solution containing 8g/L Na<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> and 0.4g/L NaOH. On this way, the coatings were fabricated using a constant voltage of 340V for 10min with a duty cycle of 10% and frequencies of 1000, 1500 and 2000Hz, respectively. According to the X-ray diffractograms of the obtained samples, the sintering process at 500°C during 1 hour generated titanium dioxide (anatase phase) porous coatings. The grain size decreased approximately from 29nm for pulse frequencies of 1000 and 1500Hz until 21nm for 2000Hz. On the other hand, for the lowest frequency value that was used in the PEO, from micrographs of scanning electron microscopy was possible to see the uniform formation of micro-cavities with the largest diameter, 0.9µm.

**Resumen.** La oxidación electrolítica por plasma (OEP) es una técnica usada para generar, con un electrolito apropiado, recubrimientos cerámicos de dióxido de titanio. La dimensión de las microcavidades y el tamaño de partícula en la superficie pueden ser controlados a través de la frecuencia y el voltaje aplicado entre los electrodos. El cambio de la morfología superficial puede conducir a aumentar la relación superficie-volumen, lo que es importante para mejorar la eficiencia del proceso catalítico heterogéneo con el TiO<sub>2</sub>, alternativo para el tratamiento de aguas residuales. En este trabajo se hizo OEP de un substrato de titanio ASME SB-265 de medidas (20x20x0.1mm) en una solución acuosa elaborada con 8g/L Na<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> y 0.4g/L NaOH. De esta manera, los recubrimientos fueron fabricados aplicando un voltaje de 340V durante 10 minutos con un ciclo útil de 10% a frecuencias de 1000, 1500 y 2000Hz. De acuerdo con los difractogramas de rayos X de las muestras obtenidas, la sinterización a 500°C durante una hora generó recubrimientos porosos de dióxido de titanio (fase anatasa). El tamaño del grano disminuyó desde aproximadamente 29nm para las frecuencias de pulso 1000 y 1500Hz hasta 21nm para 2000Hz. Por otro lado, para el valor más bajo de frecuencia que se utilizó en el PEO,

las micrografías tomadas con microscopio electrónico de barrido mostraron la formación uniforme de microcavidades con un diámetro de hasta  $0,9\mu\text{m}$ .

## Characterization and extraction of lipids from WWTP sludge for the production of biodiesel

## Caracterización y extracción de lípidos provenientes de lodos de PTAR para la producción de biodiesel

L M Mancipe Arias<sup>1</sup> and M P Triviño Restrepo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: lina.mancipe@uptc.edu.co

**Abstract.** Production from sludge of wastewater (WWTP) treatment plants and the inadequate disposal of them, are generating a serious environmental problem throughout the world; on the other hand, most of the energy used in the world comes from fossil fuels, non-renewable sources of energy that will be exhausted in the future. We evaluated the possibility of utilization of sludge from WWTP as raw material for the production of biodiesel. For the study, were taken from sludge from the WWTP of the municipality of Sotaquirá in Boyacá Department; the characterization was carried out taking into account the content of (TS) Total Solids, Volatile Solids (VS), contents of heavy metals by atomic absorption spectrophotometry. In addition, determined the chemical composition of the sludge through analysis of X-ray Fluorescence X (FRX), and determined the morphology, microstructure and composition using the analysis by SEM and EDS at different magnifications. Extraction of lipids and fatty acids was performed in Soxhlet method according to the standard method SM5520E, using n-hexane and methanol as solvent, taking into account two times of extraction (4 hours and 2.5 hours). Among the tests, showed that yields of extraction of lipids in dry base with n-hexane and methanol for 4 hours were greater than 2.5 hours, reaching values of 33% and 28% and, of 19% and 17% respectively, indicating that the extraction time can differ significantly in the extraction percentage and the amount of fat obtained. In addition, determined the acidity index samples with a value of 215%, 208% respectively stating that the extracted fat contains a high quantity of free fatty acids which will be converted to esters by esterification. With the obtained results, sludge from treatment plants of domestic wastewater as a raw material for the extraction of lipids and free fatty acids, are an alternative for the production of biodiesel.

**Resumen.** La producción de lodos provenientes de plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) y la inadecuada disposición de los mismos, están generando un serio problema ambiental en todo el mundo; por otro lado, la mayor parte de la energía que se usa en el mundo proviene de los combustibles fósiles, fuentes de energía no renovables que se agotarán en un futuro. Se evaluó la posibilidad de aprovechamiento de los lodos de PTAR como materia prima para la producción de biodiesel. Para el estudio, se tomaron lodos provenientes de la PTAR del municipio de Sotaquirá del departamento de Boyacá; la caracterización se realizó teniendo en cuenta el contenido de sólidos totales (ST), sólidos volátiles (SV), contenido de metales pesados por Espectrofotometría de Absorción Atómica. Además, se determinó la composición química de los lodos mediante análisis de fluorescencia de rayos X (FRX) y, se determinó la morfología,

microestructura y composición mediante los análisis por SEM y EDS a diferentes aumentos. La extracción de los lípidos y ácidos grasos se realizó por método Soxhlet de acuerdo al método estándar SM5520E, usando como solventes n-Hexano y metanol, teniendo en cuenta dos tiempos de extracción (4 horas y 2.5 horas). Entre los ensayos realizados, se evidenció que los rendimientos de la extracción de los lípidos en base seca con n-hexano y metanol durante 4 horas fueron mayores que durante 2.5 horas, alcanzando valores de 33% y 28% y, de 19% y 17% respectivamente, lo que indica que el tiempo de extracción puede diferir significativamente en el porcentaje de extracción y la cantidad de grasa obtenida. Además, se determinó el índice de acidez a las muestras con un valor de 215% y 208% respectivamente indicando que la grasa extraída contiene una elevada cantidad de ácidos grasos libres que serán transformados a esteres por medio de una esterificación. Con los resultados obtenidos, los lodos provenientes de plantas de tratamiento de aguas residuales domésticas como materia prima para la extracción de lípidos y ácidos grasos libres, son una alternativa para la obtención de biodiesel.

## Nanostructuring of luffa fibers by plasma glow discharge in nitrogen atmosphere

## Nanoestructuración de fibras de luffa mediante descarga luminiscente de plasma en atmósfera de nitrógeno

H A Estupiñan Duran<sup>1</sup>, J M Vélez Restrepo<sup>1</sup> and A X Velasco<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

E-mail: haestupinand@unal.edu.co

**Abstract.** Developments in textiles for aerospace and medical applications, have demanded that new natural materials with exceptional properties have a place in the design of structures of these benefits. Natural fibers extracted from loofah of the low Cauca of Antioquia, Colombia has been proposed as candidate for these applications. In an attempt to improve the properties of this fiber, a plasma glow discharge treatment under nitrogen atmosphere has been employed to nanostructure these fibers of loofah. By means of this method, the microstructural, morphological and topographic changes in the fibers were proposed by means of the variation of the reaction time, to evaluate by confocal microscopy Raman, SEM and AFM, which was related to the amorphization of the cellulose. The Raman spectral analysis showed changes in the crystalline cellulosic phase, with respect to the amorphous cellulose and the breakdown of the OH groups, corroborating the nanostructured morphological patterns produced at the different treatment times. In parallel, morphologies with patterns that interrupt the linearity of the fibers were formed, with a greater effect by increasing the treatment time. Evidence of the topographic variation with respect to the time of plasma glow discharge was observed with the increase of the roughness value Ra.

**Resumen.** Desarrollos en textiles para aplicaciones aeroespaciales y de medicina, han exigido que nuevos materiales naturales con propiedades excepcionales tengan cabida en el diseño de estructuras de estas prestaciones. Fibras naturales extraídas de lufa del bajo Cauca de Antioquia, Colombia se ha propuesto como candidato para estas aplicaciones. En un intento por mejorar las propiedades de esta fibra, un tratamiento por descarga luminiscente de plasma en atmósfera de nitrógeno ha sido empleado para nanoestructurar estas fibras de lufa. Mediante este método, se propuso con la variación del tiempo de reacción, evaluar mediante microscopía confocal Raman, SEM y AFM, los cambios microestructurales, morfológicos y topográficos en las fibras, lo cual se relacionó con la amorfización de la celulosa. El análisis espectral Raman, permitió observar cambios en la fase celulósica cristalina, respecto a la celulosa amorfa y el rompimiento de los grupos OH, corroborando los patrones morfológicos nanoestructurados producidos a los diferentes tiempos de tratamiento. Paralelamente, morfologías con patrones que interrumpen la linealidad de las fibras, fueron formados, con un mayor efecto al incrementar el tiempo de tratamiento. Evidencia de la variación topográfica respecto al tiempo de descarga luminiscente por plasma, fue observado con el incremento del valor de rugosidad Ra.



**Renewable Energy – RE**

**Energías Renovables – RE**

## Comparative study of the power supply in two osmotic membrane modules by dead-end flow fed with cyanide water

## Comparación de la densidad de energía eléctrica de dos módulos osmóticos alimentados con aguas cianuradas y flujo dead-end

E Quiñones<sup>1</sup>, C Bustos<sup>1</sup> and Y Garcia<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

Email: equinonesb@unicartagena.edu.co

**Abstract.** The present research was carried out with the aim of determining the power supply of two osmotic membrane modules operated in Dead-end flow regime. The modules were fed with fresh and cyanide waters. One module had a horizontal orientation membrane in which cyanide water was driven by gravity and another with a vertical orientation membrane where cyanide water was driven by hydrostatic pressure; in both cases, the flow was directed perpendicular to the membrane. Five samples of Ge Osmotic SE membrane were characterized using SEM, energy dispersion X-ray spectroscopy and microscopic scanner after they were immersed under four concentrations of Cyanide solutions of NaCN (25, 50, 100, 200mg/l). The flux and the pressure difference data were adjusted to a linear regression analysis to determine the membrane permeability coefficient. The Van Hoff's equation was used to estimate the potential in both modules for each concentration. The results show the module with vertical membrane present a potential of  $1.78 \cdot 10^{-4} \text{W/m}^2$  of the membrane and the module with horizontal membrane  $6.36 \cdot 10^{-5} \text{W/m}^2$ , in both cases with a maximum NaCN concentration (700mg/l). The membrane permeability coefficients were  $3.26 \cdot 10^{-3} \text{mSxBar}$  for the module with horizontal membrane and  $7.51 \cdot 10^{-4} \text{mSxBar}$  in the other module. The membrane properties don't change or present obstruction in the pores and it is constituted mainly of Carbon, Oxygen and Sulfur. The results show that the power supply is low under conditions studied compared to the literature. However, it's clear that the module with horizontal membrane has a greater potential due to the gravity action and the uniform flow contact exerted on the membrane in a short time; in view of the above, it is recommended to continue the optimization of the system using different types of membranes and configurations of the modules.

**Resumen.** La presente investigación se llevó a cabo con el objetivo de determinar el potencial eléctrico producto del gradiente de la presión osmótica en dos módulos de membrana operados bajo sistema de flujo dead-end. Los módulos fueron alimentados con aguas cianuradas. Se utilizaron dos tipos de módulos osmóticos: Uno con orientación de membrana horizontal, donde el agua cianurada fue impulsada por gravedad y otro con orientación de membrana vertical donde el agua cianurada fue impulsada por presión hidrostática; el flujo dead-end implica que el flujo se dirigió en sentido perpendicular a las membranas. Cuatro muestras de la membrana GE Osmotics SE, fueron caracterizadas por MEB, ERX de energía dispersiva y escáner microscópico, previa exposición de dichas muestras en soluciones de cianuro NaCN (25, 50, 100, 200mg/l). El coeficiente de permeabilidad de la membrana se determinó haciendo una

regresión lineal con el flujo y la diferencia de presión. El potencial de ambos sistemas y para cada concentración fue hallado mediante la ecuación de Van Hoff. Los resultados muestran que el reactor con membrana vertical presenta un potencial de  $1.78 \cdot 10^{-4} \text{W/m}^2$  de membrana y el reactor con membrana horizontal  $6.36 \cdot 10^{-5} \text{W/m}^2$ , ambos para una concentración máxima de NaCN de 700mg/l. El coeficiente de permeabilidad de la membrana fue de  $3.26 \cdot 10^{-3} \text{mSxBar}$  para el reactor con membrana horizontal y de  $7.51 \cdot 10^{-4} \text{mSxBar}$  para el reactor de membrana vertical. Las propiedades de la membrana no se modifican ni presentan obstrucción de poros y se compone principalmente de carbono, oxígeno y azufre. Los resultados permiten concluir que los potenciales generados son bajos para las condiciones estudiadas, sin embargo, es claro que el reactor con membrana horizontal tiene un mayor potencial debido a la acción de la gravedad y al contacto uniforme que el fluido hace sobre la membrana en un tiempo muy corto; por lo anterior se recomienda seguir la optimización del proceso probando diferentes tipos de membrana y diferentes configuraciones.

## Comparison of two temperature control techniques in a forced water heater solar system

## Comparación de dos técnicas de control en un sistema forzado de calentamiento de agua solar

**E Hernández<sup>1</sup>, B Reyes<sup>2</sup>, R Guzman<sup>1</sup> and A Santos<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: [emil.hernandez@upb.edu.co](mailto:emil.hernandez@upb.edu.co)

**Abstract.** A study on the performance of a forced solar heating system in which a comparative analysis of two control strategies, including the classic on- off control and PID control is performed is presented. From the experimental results, it was found that the two control strategies show a similar behavior in the solar heating system forced an approximate settling time of 60min and over- elongation 2°C for the two control strategies. Furthermore, the maximum temperature in the storage tank was 46°C and the maximum efficiency of flat plate collector were 76.7% given that this efficiency is the ratio of the energy of the radiation on the collector and the energy used to heat water. The efficiency obtained is a fact well accepted because the business efficiencies of flat plate collectors are approximately 70%.

**Resumen.** Se presenta un estudio sobre el desempeño de un sistema de calentamiento solar forzado en el cual se realiza un análisis comparativo de dos estrategias de control, que incluye el clásico control On-off y el control PID. A partir de los resultados experimentales se encontró que las dos estrategias de control presentan un comportamiento similar en el sistema de calentamiento solar forzado con un tiempo aproximado de asentamiento de 60min y sobre-elongación de 2°C para las dos estrategias de control. Por otro lado, la máxima temperatura registrada en el tanque de almacenamiento fue de 46°C y la máxima eficiencia del colector de placa plana fue de 76.7% teniendo en cuenta que esta eficiencia es la relación entre la energía de la radiación que incide en el colector y la energía usada para calentar el agua. La eficiencia obtenida es un dato de muy buena aceptación debido a que las eficiencias comerciales, de colectores de placa plana tienen un valor de aproximadamente 70%.

# Construction, study and mathematical modelling of the electrical behavior of CZTS photovoltaic materials as function of time and synthesis temperature

## Construcción, estudio y modelamiento matemático del comportamiento eléctrico de materiales fotovoltaicos CZTS como función del tiempo y la temperatura de síntesis

M Patarroyo Mesa<sup>1</sup>, E Vera López<sup>1</sup> and J A Gómez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: miguel.patarroyo@uptc.edu.co

**Abstract.** Current work displays the obtention, study and mathematical modelling of CZTS (Cu<sub>2</sub>ZnTiS<sub>4</sub>) photovoltaic material, as a function of temperature (200, 225, 250, 275 and 300°C) and synthesis time (24, 48 and 72 hours) under hydrothermal conditions. For this purpose, the obtention of solids was evaluated by means X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), Raman spectroscopy, ultraviolet spectroscopy (UV) and solid state impedance spectroscopy (IS). The results allowed to confirm the obtention of semiconducting materials with a band-gap around 1.45eV, with a crystalline structure concordant with a tetragonal geometry of space group I-42m and a crystalline orientation along (1 1 2) facet, with particle sizes in the nanometric scale (5-6nm). The morphological characterization, confirm that solids possess a definite and homogeneous appearance related with the synthesis method and a regular distribution of particles. The results of the electrical characterization, show a semiconductor behavior of solids consistent with conductivity values that can be modeled by a variance analysis verified through the Kramers-kronig transform. These results allowed to validate, in a preliminary way, a mathematical model that fit to an equation type:  $C(T,t)=B_0+B_1T+B_1t+B_1T*t+E$ . Where T and t correspond with the temperature and synthesis time, the B<sub>i</sub> are the coefficients adjusted to the model and E the experimental error, demonstrating that exist some optimal values of time and temperature for the obtention of conductive materials. The Kramers-Kronig relations are mathematical equations that describe the relationship between the real and imaginary parts of complex analytic functions in the complex upper half plane. These relationships are used to calculate the real and imaginary parts of responses in physical systems in a linear, causal, estable process and finite impedance, therefore they help us to verify that the data of the impedance spectroscopy are taken correctly. These equations are expressed as:  $Z'(ω)=Z'(∞)+2/π∫_0^∞ [(xZ''(x)-ωZ''(ω))/(x^2-ω^2) dx]$  ;  $Z''(ω)=Z''(0)+2ω/π∫_0^∞ [(ω/x)(Z''(x)-Z''(ω))/(x^2-ω^2) dx]$  ;  $Z''(ω)=-2ω/π∫_0^∞ [(Z'(x)-Z'(ω))/(x^2-ω^2) dx]$  ;  $Φ(ω)=2ω/π∫_0^∞ [ln|Z(x)|/(x^2-ω^2) dx]$  Where Z'(ω) and Z''(ω) are the real and imaginary parts of the impedance at a given frequency; ω and x are the angular frequencies; Z'(x) and Z''(x) are continuous functions that provide the real and imaginary parts of the impedance, respectively, in function of the angular frequency (x) with 0.

**Resumen.** El presente trabajo muestra el proceso de obtención, estudio y modelamiento matemático de un material fotovoltaico de CZTS ( $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$ ), como una función de la temperatura (200, 225, 250, 275 y 300°C) y de los tiempos (24, 48 y 72 horas) de síntesis hidrotérmica utilizados. Para este propósito, la obtención de los materiales tuvo que ser validada mediante técnicas de caracterización tales como difracción de rayos X (XRD), microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopia Raman, espectroscopia ultravioleta (UV) y espectroscopia de impedancias de estado sólido (IS). Los resultados de caracterización, permitieron confirmar en todos los casos la obtención de materiales semiconductores con un band-gap alrededor de 1.45eV, con una estructura cristalina concordante con una geometría tetragonal de grupo espacial I-42m y una orientación cristalina preferente en el plano (1 1 2), con tamaño de partícula del orden nanométrico (5-6nm). Los resultados morfológicos muestran que los materiales poseen características propias del método de síntesis utilizado y una distribución regular de partículas. Los resultados de la caracterización eléctrica, demuestran un comportamiento semiconductor de los sólidos concordante con valores de conductividad que pueden ser modelados mediante un análisis de varianza y verificados a través de la transformada de Kramers-kronig. Dichos resultados permitieron validar de forma preliminar un modelo matemático que se ajusta a una ecuación tipo:  $C(T,t)=B_0+B_1T+B_1t+B_1T*t+E$ . Donde T y t corresponden a las variables temperatura y tiempo de síntesis, los  $B_i$  son los coeficientes ajustados al modelo y E el error experimental, demostrando que existen valores de tiempo y temperatura óptimos para la obtención de las características conductoras buscadas en este tipo de materiales. Las transformadas de Kramers-Kronig son ecuaciones que describen la relación entre las partes real e imaginaria de funciones analíticas en el plano complejo. Estas relaciones son usadas para calcular la parte real e imaginaria de funciones de respuesta en sistemas físicos en un proceso lineal, causal, estables y con impedancia finita, por tanto, nos ayudan a verificar que los datos de la espectroscopia de impedancia estén tomados correctamente. Estas ecuaciones se expresan como:

$$Z'(\omega) = Z'(\infty) + 2/\pi \int_0^\infty \frac{[xZ''(x) - \omega Z''(\omega)] / (x^2 - \omega^2)}{dx} dx ;$$

$$Z''(\omega) = Z''(0) + 2\omega/\pi \int_0^\infty \frac{[(\omega/x)(Z''(x) - Z''(\omega))] / (x^2 - \omega^2)}{dx} dx ; Z''(\omega) = -2\omega/\pi \int_0^\infty \frac{[(Z'(x) - Z'(\omega))] / (x^2 - \omega^2)}{dx} dx ; \Phi(\omega) = 2\omega/\pi \int_0^\infty \frac{[\ln|Z(x)|] / (x^2 - \omega^2)}{dx} dx$$

donde  $Z'(\omega)$  y  $Z''(\omega)$  son las partes real e imaginaria de la impedancia a una frecuencia dada;  $\omega$  y  $x$  son las frecuencias angulares;  $Z'(x)$  y  $Z''(x)$  son funciones continuas que proporcionan la parte real y la imaginaria de la impedancia, respectivamente, en función de la frecuencia angular ( $x$ ) con 0.

## Design of a residential micro-network in Lagos del Cacique, Bucaramanga Colombia

## Diseño de una micro-red residencial en Lagos del Cacique, Bucaramanga Colombia

A D Martinez Amariz<sup>1,2</sup> and D Bellon Monsalve<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Foundation of Researches in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: alejandrom@udes.edu.co

**Abstract.** The growth in the use of renewable energies has had repercussions on a concept of distributed generation. However, this concept associates technical and environmental issues that must be taken into account. The modeling and planning of micro-networks represent crucial and critical stages in the study and implementation of micro-networks, given a large number of components to be integrated and the many characteristics of each one. From the HOMER software, a simulation of a micro-network is made, to which a set of components with specific characteristics is integrated. Investment, operation and maintenance costs are detailed in order to determine the configuration with better environmental and economic benefits. This model analyzes the options to provide power to an out-of-network home in Cacique's lakes in Bucaramanga, Colombia. The variables considered for the sensitivity analysis correspond to the price of gasoline and the variation in loads. The simulation results suggest an optimal configuration of Microrred in generator-photovoltaic-battery panel. The sensitivity variables were specified in order to evaluate the effect of the uncertainties. The simulation was done through the HOMER software and the results of the combinations showed that the optimum configuration suggests a hybrid system of a solar panel, a gas generator of 2.6kW, 8 batteries and an inverter. For this case, the average cost per kWh of useful electrical energy produced by the system is \$0.927USD, the lowest of all other configurations.

**Resumen.** El crecimiento en el uso de las energías renovables ha repercutido sobre un concepto de generación distribuida. Sin embargo, dicho concepto asocia cuestiones de tipo técnico y ambiental que deben ser tenidas en cuenta. El modelado y la planeación de micro-redes representan etapas cruciales y críticas en el proceso de estudio e implementación de micro-redes, dado el gran número de componentes a integrar y las numerosas características propias de cada uno. A partir del software HOMER, se hace una simulación de una micro-red, a la cual se le integra un conjunto de componentes con características específicas. Se detallan costos de inversión, operación y mantenimiento, a fin de determinar la configuración con mejores beneficios tanto ambientales como económicos. Este modelo analiza las opciones para proporcionar energía a una casa fuera de la red en lagos del cacique en Bucaramanga, Colombia. Las variables consideradas para el análisis de sensibilidad corresponden al precio de la gasolina y la variación en las cargas. Los resultados de simulación sugieren una configuración óptima de Microrred en generador-panel fotovoltaico-batería. Las variables de sensibilidad fueron

especificadas, a fin de evaluar el efecto de las incertidumbres. La simulación se realizó a través del software HOMER y los resultados de las combinaciones evidenciaron que la óptima configuración sugiere un sistema híbrido de un panel solar, un generador a gasolina de 2.6kW, 8 baterías y un inversor. Para este caso, el costo promedio por kWh de energía eléctrica útil producida por el sistema es de \$0,927USD, siendo el menor de todas las demás configuraciones.



# Hydrothermal synthesis and characterization of the semiconductor material $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$

## Síntesis hidrotérmica y caracterización del material semiconductor $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$

H G Pérez Bustos<sup>1</sup>, M Patarroyo Mesa<sup>1</sup>, E Vera López<sup>1</sup>, J A Gómez<sup>1</sup> and Y Pineda Triana<sup>1</sup>  
<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: hellem.perez@uptc.edu.co

**Abstract.** This paper describes the results of the synthesis and characterization of semiconductor quaternary materials based on  $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$  (abbreviated CZTS), using a hydrothermal technique. The results confirm that time (24, 48 and 72 hours) and temperature (200, 225, 250, 275, and 300°C) factors used in synthesis process, regulate different levels of electrical conductivity in these materials. The results of the ultraviolet spectroscopy (UV) analysis confirm the production of semiconductor solids with Band-gap values around 1.5eV, being coherent with a strong absorption in the ultraviolet region. The X-ray diffraction analysis (XRD), confirm that there is an opposite and proportional relationship between the crystal sizes, the reaction times and the synthesis temperature. In all cases, the particle sizes were around 50-100nm. The results derived from scanning electron microscopy (SEM), confirm the obtention of homogenous materials with optimal morphological properties in accordance with synthesis method. Similarly, the composition values derived from the X-ray dispersion spectroscopy analysis (EDX), shows that obtained compositions are in agree with expected values. Finally, the results of electric characterization, confirm that used synthesis parameters show a strong dependence on the conductive behavior of solids being the most relevant result the shown by the solid obtained at 300°C and 72 hours of reaction in accordance with preliminary works.

**Resumen.** El presente trabajo describe los resultados de la síntesis y caracterización de materiales cuaternarios semiconductores tipo  $\text{Cu}_2\text{ZnTiS}_4$  (abreviadamente CZTS), mediante la implementación de una técnica hidrotérmica. Los resultados confirmaron que tanto los tiempos (24, 48 y 72 horas) como las temperaturas utilizadas (200, 225, 250, 275, y 300°C), determinan distintos niveles de conductividad eléctrica en los materiales. Los resultados del análisis por espectroscopía UV, confirman la obtención de sólidos semiconductores con valores de band-gap alrededor de 1.5eV, en concordancia con una fuerte absorción en la región del ultravioleta. Los resultados del análisis estructural realizado mediante difracción de rayos X (XRD), confirman que existe una relación inversamente proporcional entre los tamaños del cristal y los tiempos y temperaturas de reacción, lográndose obtener materiales en la escala nanométrica comprendidos entre los 50-100nm en todos los casos. Los análisis por microscopía electrónica de barrido (SEM), confirman la generación de materiales con propiedades morfológicas homogéneas y propias del método de síntesis, similarmente los valores de composición derivados del análisis por espectroscopía de dispersión de rayos X (EDX), confirmaron una buena correlación entre las composiciones experimentales y la esperada. Finalmente, los resultados de la caracterización

eléctrica confirman un comportamiento conductor dependiente de los parámetros de síntesis utilizados, siendo el más relevante el mostrado por el sólido obtenido a 300°C y 72 horas de reacción en concordancia con trabajos preliminares.

## Magnetic field effect on excitons in MAPbI perovskite

### Efecto de un campo magnético sobre excitones en perovskitas MAPbI

C L Beltrán Ríos<sup>1</sup>, S Celis<sup>1</sup> and E A Menendez Proupin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile

Email: carlosleonardob@gmail.com

**Abstract.** In this work are showing the results obtained from the study of the effects of a magnetic field on some energy levels of an exciton inside of the perovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  (MAPbI). This material has been studied in recent years due to its efficiency in the conversion of solar energy into electric current in photocells, this has been associated with the presence of excitons and their interaction with the lattice. The results were obtained in the steady-state perturbation theory using as basis functions those obtained in the work of Menendez-Proupin at al. The results show an increase of energy with the applied field. The transitions between levels have been modeled by a Lorentzian distribution.

**Resumen.** En este trabajo se muestran los resultados obtenidos del estudio de los efectos de un campo magnético sobre algunos niveles de energía de un excitón que se presentan al interior de la perovskita  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  (MAPbI). Este material se ha estudiado en los últimos años debido a su eficiencia en la conversión de energía solar en corriente eléctrica en fotoceldas, esto se ha asociado a la presencia de excitones y su interacción con la red de átomos. Los resultados se obtuvieron haciendo uso de la teoría de perturbaciones del estado estacionario usando como funciones base las obtenidas en el trabajo de Menendez-Proupin at al. Los resultados muestran un incremento de la energía con el campo aplicado. Las transiciones entre niveles se han modelado mediante una distribución lorentziana.

## Optical and mechanical characterization of absorber surfaces of solar collectors subjected to durability tests

## Caracterización óptica y mecánica de superficies absorbedoras de colectores solares planos sometidas a pruebas de durabilidad

**B Cruz Muñoz<sup>1</sup>, M Miki Yoshida<sup>2</sup> and R Dorantes Rodríguez<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia

<sup>2</sup> Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C., Chihuahua, México

<sup>3</sup> Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Ciudad de México, México

Email: bcruz@utp.edu.co

**Abstract.** Among low temperature solar energy applications, are the swimming pools and domestic water heating, which now allow the substitution of liquid petroleum gas and diesel, regularly used. Glass covered flat plate solar collectors technology with copper tubes and copper or aluminum fins are widely used, whose surfaces are covered with high absorptivity and low emissivity selective surfaces or paint. This work presents a comparative experimental study of two commercial surface coatings (epoxy and acrylic) applied on copper and aluminum surfaces and subjected to durability tests in a saline chamber and accelerated weathering. In addition, a thermogravimetric (TGA) analysis was performed to the three first samples in order to find the temperature at which the coatings began to decompose. In the saline chamber test the relative humidity was set at 100%, the saline atmosphere at 5%, and the exposure time between 17 and 38 days. At the accelerated weathering test, ultraviolet radiation was used with an exposure time of 49 days. Following, adherence (ASTM D3359-9) and hardness (ASTM D3363-05) tests were performed. The absorptivity was also determined at room temperature, in the range of 250-2500nm (indirectly obtained from the reflectivity ASTM E424-71), and the emissivity in the interval from 40°C to 160°C (ASTM E 1933-99A). From the thermogravimetric analysis, it was obtained that the temperature at which the coatings start to degrade is at 175°C, which is the adequate for low and average temperature in solar applications. The salinity test during the exposure time showed that the epoxy on the aluminum, held constant its initial adherence classification of 5B (the coating did not peel or flake off), while the acrylic on the copper passed from 5A classification (0% peeling) to a 4A (which is less than 5% peeling). Whereas acrylic coating on aluminum after 17 days, passed from 0% (5B) to more than 5% peeling (3A) from the surface, and after 24 days it grew to 50% peeling (1A). In these tests, after 38 days of exposure, the absorptivity (in every solar spectrum) of the epoxy on the aluminum passed from 0.95 to 0.92, while acrylic on copper and the acrylic on aluminum changed from 0.94 to 0.91. The emissivity measurement in the salinity tests, showed that after 38 days, the aluminum coated with epoxy held its values almost constant (0.90 to 0.89), while for the copper coated with acrylic, after 38 days, its initial emissivity passed from 0.93 to 0.88. For the aluminum coated with acrylic, the initial average emissivity passed from 0.98 to a final average of 0.85, after 38 days. In the accelerated weathering test on both coatings, adhesion and hardness kept their properties and the loss due to flaking is not over 5%. The absorptivity results were between 0.93 and 0.95 for the three coatings, which were very similar to those obtained in the same coatings without exposing them to any aging process. The emissivity of the epoxy on the aluminum went

from an initial average value of 0.89 to 0.96 after 49 days. For the case of the acrylic coating on copper, its initial average emissivity passed from 0.93 to 0.86, for the same period. Finally, for the acrylic coating on aluminum, its initial average emissivity passed from 0.98 to 0.90 in the same period of time. Therefore, the conclusion is that the epoxy coating on aluminum showed the best combined results of adherence, hardness, absorptivity and emissivity, followed by the acrylic coating on copper, and finally the acrylic coating on aluminum. However, the three combinations presented high emissivity values, which are not favorable for thermal solar collectors. Thus, it will be necessary to improve the optical properties of the paints or use complementary coatings to minimize the emissivity.

**Resumen.** Entre las aplicaciones de la energía solar en procesos de baja temperatura destacan el calentamiento térmico de piscinas y de agua de uso doméstico, lo cual está permitiendo sustituir el uso de gas licuado de petróleo y de diésel, empleados comúnmente. Una de las tecnologías solares de mayor uso es la que utiliza calentadores solares planos con cubierta de vidrio, donde son empleados tubos de cobre con aletas de cobre o de aluminio, cuyas superficies tienen recubrimientos a base de pinturas o de superficies selectivas de alta absorptividad y de baja emisividad. En este trabajo se presenta un estudio experimental comparativo de dos recubrimientos comerciales (epóxico y acrílico) aplicados sobre superficies de cobre y aluminio, sometidos a pruebas de durabilidad en cámara salina e intemperismo acelerado. Adicionalmente, se hizo una prueba de análisis termogravimétrico (TGA) de las tres muestras iniciales, con el propósito de conocer la temperatura a la cual los recubrimientos comienzan a descomponerse. En la prueba de cámara salina se utilizó humedad relativa (100%), atmósfera salina (5%) y tiempo de exposición entre 17 y 38 días. En la prueba de intemperismo acelerado se empleó radiación ultravioleta y tiempo de exposición de 49 días. Posteriormente, se realizaron pruebas de adherencia (ASTM D3359-9) y dureza (ASTM D3363-05). Adicionalmente, se determinó una temperatura ambiente la absorptividad en el rango de 250-2500nm (obtenida indirectamente de la reflectividad ASTM E424-71) y la emisividad en el intervalo de 40°C a 160°C (ASTM E 1933 – 99A). Del análisis termogravimétrico se obtuvo que la temperatura a la que empiezan a degradarse los recubrimientos es 175°C, la cual es adecuada para aplicaciones solares de baja y media temperatura. En la prueba de salinidad durante todo el tiempo de exposición, el epóxico sobre aluminio mantuvo constante su clasificación inicial de adherencia 5B (no se presentó levantamiento alguno del recubrimiento), mientras que el acrílico sobre cobre pasó de una clasificación inicial de 5A (0% de desprendimiento) a 4A (que equivale a menos del 5% de desprendimiento). En tanto que, en acrílico sobre aluminio, después de 17 días, pasó de un desprendimiento de 0% (inicial) a una clasificación 3A (desprendimiento mayor al 5% de la superficie) y a partir de este momento y luego de 24 días se movió a la clasificación 1A (remoción de más del 50% del área superficial de recubrimiento). En estas pruebas, luego de 38 días de exposición, la absorptividad (en todo el espectro solar) del epóxico sobre aluminio pasó de un valor promedio de 0.95 a 0.92, en tanto que el acrílico sobre cobre y acrílico sobre aluminio registraron cambios pasando de un valor promedio de 0.94 a 0.91. La medición de emisividad mostró que, en las pruebas de salinidad, luego de 38 días, el epóxico sobre aluminio mantuvo casi constante sus valores de emisividad (de 0.90 a 0.89). Para el acrílico sobre cobre, su emisividad inicial promedio pasó de un valor de 0.93 a un valor de 0.88, luego de 38 días. Y en el caso de acrílico sobre aluminio, la emisividad promedio inicial pasó de 0.98 a un valor final promedio de 0.85, luego de 38 días. Para la prueba de intemperismo acelerado con ambos recubrimientos, la adhesión y la dureza conservan sus propiedades y las pérdidas por descamación no superan el 5%. Los resultados de absorptividad, presentaron valores comprendidos entre 0.93 y 0.95 para los tres recubrimientos, resultados muy similares a los obtenidos en estos recubrimientos sin exponerlos a ningún tipo de envejecimiento. La

emisividad del epóxico sobre aluminio pasó de un valor inicial promedio de 0.89 a un valor de 0.96, luego de 49 días. Para el caso de acrílico sobre cobre, su emisividad inicial promedio pasó de un valor de 0.93 a un valor de 0.86, para el mismo periodo de tiempo. Finalmente, para acrílico sobre aluminio, su emisividad inicial promedio pasó de un valor de 0.98 a un valor de 0.90 en el mismo intervalo de tiempo. Estos resultados nos permiten concluir que el epóxico sobre aluminio presentó la mejor combinación de resultados de adherencia, dureza, absorptividad y emisividad, seguido del recubrimiento de acrílico sobre cobre y finalmente de acrílico sobre aluminio. Sin embargo, los resultados muestran que los tres recubrimientos tienen valores elevados de emisividad, aspecto que no es favorable en colectores solares térmicos y sería necesario mejorar las propiedades ópticas de las pinturas o utilizar recubrimientos complementarios que la minimicen.

## Performance of thermal storage system by parafin wax and fatty acid

## Rendimiento de sistema de almacenamiento térmico a través de cera de parafina y ácido graso

E Hernández<sup>1</sup>, R Guzman<sup>1</sup>, G Garcia Sanchez<sup>1</sup> and A Santos<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

Email: [emil.hernandez@upb.edu.co](mailto:emil.hernandez@upb.edu.co)

**Abstract.** Solar energy is an essentially inexhaustible source potentially capable of meeting a significant portion of the nation's future energy needs with a minimum of adverse environmental consequences. Solar energy is one of the most promising of the unconventional energy sources. Solar energy is intermittent, unpredictable and available only during the day. It varies as a factor of time, weather condition and latitude. One of prospective techniques of storing solar energy is the application of phase change materials (PCMs). Phase change materials (PCMs) for thermal energy storage (TES) are materials supplying thermal regulation at particular phase change temperatures by absorbing and emitting the heat of the medium. PCMs absorb energy during the heating process as phase change takes place and release energy to the environment in the phase change range during a reverse cooling process. The objective of the present study is to investigate the performance and characteristics of thermal energy storage in training system (Ecosence LHS Based) using phase change materials (paraffin wax and Fatty Acid).

**Resumen.** La energía solar es una fuente inagotable y sustancialmente capaz de satisfacer una parte importante de las futuras necesidades energéticas de la población mundial con un mínimo de consecuencias ambientales desfavorables. La energía solar es una de las fuentes no convencionales de energía renovable más prometedoras. Dicha energía es intermitente, impredecible pero disponible sólo durante el día, varía por el factor de tiempo, las condiciones climáticas y la latitud. Una de las técnicas posibles de almacenar la energía solar es la utilización de materiales de cambio de fase (PCMs). Los materiales de cambio de fase en sistemas TES (Almacenamiento Térmico de Energía) son materiales que suministran regulación térmica en particular, las temperaturas de cambio de fase mediante la absorción y emisión del calor al medio. La energía absorbida por el PCM durante el proceso de carga da lugar a un cambio de fase y la liberación de energía hacia el medio ambiente se lleva a cabo en el intervalo de cambio de fase durante un proceso de enfriamiento inverso. El objetivo del presente estudio es investigar el comportamiento y las características del almacenamiento de energía térmica en el sistema de almacenamiento de energía (Ecosence LHS Based) utilizando materiales de cambio de fase (cera de parafina y ácidos grasos).

## Production of biogas from organic solid residues, by the use of biogidestor in bank scale

## Producción de biogás a partir de residuos solidos orgánicos, por el uso de biogidestor en escala de bancada

A D Martinez Amariz<sup>1,2</sup> and J Carreño<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Foundation of Researches in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: alejandrom@udes.edu.co

**Abstract.** Environmental problems have uncontrollably grown because of different factors, including solid urban waste; for years solid urban waste had a rapid increase due to human habits and the inadequate management that has been carried out mainly with the final disposal, treatment or disposal of this waste. Most of the organic fractions of urban solid waste deposited in the different sanitary landfills and open dumps during their decomposition stage undergo different changes due to the action of the microorganisms producing carbon dioxide (CO<sub>2</sub>), methane (CH<sub>4</sub>) And other waste gases, which are also called greenhouse gases (GHG). The objective of the present work is to evaluate the efficiency of biogas production from organic solid waste generated in the University Restaurant of the Technology Center of the Federal University of Rio de Janeiro (UFRJ) through anaerobic digestion in scale digesters Bench. During this study, an anaerobic digestion test was carried out in a bench scale biodigester for a period of 48 days, prepared with organic solid waste, anaerobic sludge and residual water; Being analyzed and controlled different chemical parameters, besides the values of temperature and pH. The test prepared for this project consisted of 6% of total solids consisting of solid wastes, anaerobic sludge and wastewater, resulting in an efficiency of removal of total volatile solids of 55% and the production of approximately 38% methane gas, 43% CO<sub>2</sub> and 10% H<sub>2</sub>S.

**Resumen.** Los problemas ambientales han tenido un crecimiento incontrolable a causa de diferentes factores, entre ellos podemos encontrar los residuos sólidos urbanos; durante años los residuos sólidos urbanos tuvieron un apresurado incremento a causa de los hábitos humanos y el inadecuado manejo que se ha llevado a cabo principalmente con la disposición final, tratamiento o eliminación de estos residuos. Gran parte de las fracciones orgánicas de los residuos sólidos urbanos depositados en los diferentes rellenos sanitarios y botaderos a cielo abierto, durante su etapa de descomposición sufren diferentes cambios a causa de la acción de los microorganismos produciendo dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), metano (CH<sub>4</sub>) y otros gases residuales, los cuales son llamados también gases de efecto invernadero (GEI). El presente trabajo tiene por objetivo evaluar la eficiencia de la producción de biogás a partir de residuos sólidos orgánicos generados en el Restaurante Universitario del Centro de Tecnología de la Universidad Federal de Rio de Janeiro (UFRJ) a través de la digestión anaerobia en biodigestores en escala de bancada. Durante este estudio fue realizado un ensayo de digestión anaerobia en un biodigester en escala de bancada por un periodo de 48 días, preparado con residuos sólidos orgánicos, lodo anaerobio y



agua residual; siendo analizados y controlados diferentes parámetros químicos, además de los valores de temperatura y pH. El ensayo preparado para este proyecto se conformó de 6% de sólidos totales constituidos por los residuos sólidos, lodo anaerobio y agua residual, obteniendo como resultado una eficiencia de remoción de sólidos totales volátiles del 55% y la producción de aproximadamente 38% de gas metano, 43% de CO<sub>2</sub> y 10% de H<sub>2</sub>S.

# Synthesis and characterization of the $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ crystalline ceramic oxide

## Síntesis y caracterización del óxido cerámico cristalino tipo $\text{LiMn}_2\text{O}_4$

A Y Neira Guio<sup>1</sup> and J A Gómez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: ariatna.neira@uptc.edu.co

**Abstract.** The present work describes the synthesis and characterization of a  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  ceramic oxide using a combustion technique through which citrate intermediates were obtained, leading to the production of a pure crystalline phase of material at  $850^\circ\text{C}$ . In the initial stage of the process, metal nitrate solutions ( $\text{LiNO}_3\text{-Mn}(\text{NO}_3)_2$ ) and citric acid were used, which were treated at  $120^\circ\text{C}$  under reflux conditions, until the obtention of a gel which served as the basis for the production of the final ceramic oxide. This precursor was characterized by infrared spectroscopy (FTIR) to evaluate the formation of the respective citrates, identifying the main functional groups of the material. The calcined solid was characterized by X-ray diffraction (XRD) and scanning and transmission electron microscopy (SEM-TEM), the results allowed to identify a uniform morphology and texture in the nanometric scale (5nm). The results of the structural characterization showed the presence of a characteristic signal along the (1 1 1) diffraction facet, with interplanar distances of 0.45nm. The chemical composition of the solid was determined by X-ray fluorescence (XRF), indicating the coherence of the proposed composition and validating the effectiveness of the synthesis method. The electrical characterization developed by solid-state impedance spectroscopy (IS), allowed to obtain conductivity values around  $2.70 \times 10^{-8} \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ , related with a mixed conductivity behavior (MIEC), which can be explained by virtue of the mobility of oxygen vacancies in the material for potential applications in the design of cathodes for lithium-ion batteries.

**Resumen.** El presente trabajo, describe la síntesis y caracterización de un óxido cerámico tipo espinela  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ , utilizando una ruta de química húmeda de polimerización-combustión a través de la cual se obtuvieron intermediarios tipo citrato propiciando la obtención de una fase cristalina pura del material a una temperatura de  $850^\circ\text{C}$ . En la etapa inicial del proceso se partió de disoluciones de nitratos metálicos ( $\text{LiNO}_3\text{-Mn}(\text{NO}_3)_2$ ) y ácido cítrico, que se trataron a una temperatura de  $120^\circ\text{C}$  bajo condiciones de reflujo, hasta la consolidación de un gel, que luego de someterse a un posterior tratamiento térmico conformó un precursor metalorgánico sólido que sirvió de base para la obtención del óxido cerámico final. Este precursor, se caracterizó por espectroscopia infrarroja (FTIR) para evaluar la formación de los respectivos citratos identificando los principales grupos funcionales del material. El sólido calcinado se caracterizó por difracción de rayos X (XRD) y microscopia electrónica de barrido y transmisión (SEM-TEM), los resultados permitieron identificar una morfología y textura uniforme con tamaños de partícula en la escala nanométrica (5nm). Los resultados de la caracterización estructural

demostraron la presencia de una señal característica a lo largo del plano de difracción (1 1 1), con distancias interplanares de 0.45nm. La composición química del sólido fue determinada mediante fluorescencia de rayos X (XRF), indicando la coherencia de la composición propuesta y validando la efectividad del método de síntesis. La caracterización eléctrica desarrollada por espectroscopía de impedancias (IS) de estado sólido, permitió determinar valores de conductividad alrededor de  $2.70 \times 10^{-8} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ , relacionado con un comportamiento de conductividad mixta (MIEC), que puede explicarse en virtud de la movilidad de vacancias de oxígeno en el material para potenciales aplicaciones en la fabricación de cátodos para baterías de ion-litio.

## **Synthesis of a proton exchange membrane using styrene-acrylic ester copolymer and loaded with vanadium pentoxide for application in fuel cells**

## **Síntesis de una membrana de intercambio protónico usando copolímero de estireno-éster acrílico y cargada con pentóxido de vanadio para aplicación en celdas de combustibles**

**A Realpe<sup>1</sup>, J Pérez<sup>1</sup> and M Acevedo<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

Email: arealpe@unicartagena.edu.co

**Abstract.** In this work, polymeric membranes were synthesized from the copolymer of styrene – acrylic ester, for the generation of clean energy using fuel cells. The properties of these membranes were modified by sulfonation reaction and the addition of vanadium pentoxide. Each membrane was characterized using different techniques for evaluating properties such as ion exchange capacity, oxidative stability, tensile test; all this in order to study the physicochemical and mechanical properties of the manufactured materials. The results showed that sulfonated membrane for 3 hours has the highest potential of being used in fuel cell, and its percentage of water absorption of 30.8%, ion exchange capacity of 1.1 meq/g and a tensile strength of 52.8N. In addition, this membrane was subjected to the test of proton conductivity by the method of electrochemical impedance under dry conditions, obtaining a value of  $4.6 \cdot 10^{-8}$  S/cm, which is similar to that recorded by other research.

**Resumen.** En el presente trabajo, se sintetizaron membranas poliméricas a partir del copolímero estireno – éster acrílico, para la generación de energía limpia usando celdas de combustible. Las propiedades de las membranas fueron modificadas a través de la reacción de sulfonación y adición de pentóxido de vanadio. Cada una de las membranas fue caracterizada, utilizando diferentes técnicas, evaluando propiedades como capacidad de intercambio iónico, estabilidad oxidativa, pruebas de tracción; todo esto con el fin de estudiar las propiedades fisicoquímicas y mecánicas de los materiales fabricados. Los resultados mostraron que la membrana sulfonada por 3 horas tiene el mayor potencial de ser usada en celdas de combustible, siendo su porcentaje de absorción de agua de 30,8%, capacidad de intercambio iónico de 1,1 meq/g y resistencia a la tracción de 52,8N. Además, esta membrana fue sometida a la prueba de conductividad protónica por el método de impedancia electroquímica bajo condiciones secas, obteniéndose un valor de  $4,6 \cdot 10^{-8}$  S/cm el cual es similar al registrado por otras investigaciones.

## Wind potential of the municipality of Soledad (Atlántico) for renewable electricity generation

## Potencial eólico del municipio de Soledad (Atlántico) para la generación de energía eléctrica renovable

A Realpe<sup>1</sup>, J Pérez<sup>1</sup> and M Acevedo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

Email: arealpe@unicartagena.edu.co

**Abstract.** The potential of renewable electric energy generated from the wind in the municipality of Soledad, Atlántico-Colombia was studied through mathematical modelling. The available wind resource was studied by analyzing wind speed and direction given by the IDEAM meteorological station, located at Ernesto Cortissoz Airport. In the 2014 and 2015 years, the municipality of Soledad presented annual averages of the wind speed of 3.60 and 3.98m/s, respectively. The results indicate that it is possible to generate power between 957, 6-4216, 8MWh/, depending on the capacity of the wind generator used in the simulation (between 1 MW and 2.75MW) and its location height. The economic analysis indicates that the Vestas wind turbine of 2000kW presented the lowest cost of generation with 209.9 \$/kWh and an annual production about 2133.2MWh. If the energy is sold at \$ 324.7/kWh (value in stratum 3), the project would not be profitable, since the net present value (VPN) would be \$ -1,346.3 and the recovery time of the investment (TRI) 26.9 years is higher than the useful life of the turbine.

**Resumen.** El potencial de energía eléctrica renovable generada a partir del viento en el municipio de Soledad, Atlántico-Colombia fue estudiada mediante la modelación matemática. Se estudió del recurso eólico disponible analizando los datos de velocidad y dirección del viento dados por la estación meteorología del IDEAM, situada en el aeropuerto Ernesto Cortissoz. En los años 2014 y 2015, el municipio de Soledad presentó promedios anuales de la velocidad del viento de 3,60 y 3,98m/s, respectivamente. Los resultados indican que es posible generar energía entre 957,6 – 4216,8MWh/año, dependiendo de la capacidad del aerogenerador usado en la simulación (entre 1MW y 2,75MW) y su altura de ubicación. El análisis económico indica que el aerogenerador Vestas de 2000kW, presentó el más bajo costo de generación con 209,9 \$/kWh y una producción anual cerca de 2133.2MWh. Si la energía es vendida a \$324,7/kWh (valor en un domicilio de estrato 3), el proyecto no sería rentable, ya que el valor presente neto (VPN) sería de \$ -1.346.3 y el tiempo de recuperación de la inversión (TRI) de 26,9 años, mayor a la vida útil de la turbina.

## **Surface Hardening Processes - SHP**

## **Procesos de Endurecimiento Superficial – SHP**

## **Determination of the influence of austempering applied to investment casting steel IC 4140**

## **Determinación de la influencia de austempering aplicado a un acero microfundido IC 4140**

**D L Blanco Estupiñan<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: david.blanco@escuelaing.edu.co

**Abstract.** This work has as main objective to present the results of the research process focused on the improvement of mechanical properties of it, for applying different curves of heat treatment of austempering, and achieving the bainitic transformation in the microstructure, thus guaranteeing a significant improvement compared to a traditional treatment such as tempering and tempering. Variables such as austenization temperatures, cooling curves and microstructure evaluation were evaluated in order to analyze the influence of bainite formation on the significant improvement of hardness, ultimate tensile strength. The results obtained can contribute to the improvement and application of heat treatments to steels obtained by microfining process in the industry.

**Resumen.** La presente investigación tiene como objetivo principal dar a conocer los resultados del proceso de investigación enfocado en el mejoramiento de propiedades mecánicas de este, al aplicar diferentes curvas de tratamiento térmico de austempering y lograr la transformación bainítica en la microestructura, para garantizar una mejora significativa en comparación con un tratamiento tradicional, como lo son el temple y revenido. Variables tales como las temperaturas de austenización, las curvas de enfriamiento y la evaluación de la microestructura fueron evaluadas con el fin de analizar la influencia de la formación de la bainita en el mejoramiento significativo de dureza, resistencia última a tracción. Los resultados alcanzados pueden contribuir a la mejora y aplicación de tratamientos térmicos a aceros obtenidos por proceso de microfundición en la industria.

**Structural Integrity - SI**

**Integridad Estructural - IS**



## Assessing of the effect of hydrodynamics in the growth of scale (CaCO<sub>3</sub>) in rotating cylinder electrode

## Evaluación de la influencia de la hidrodinámica en el crecimiento de incrustaciones de CaCO<sub>3</sub> en electrodo de anillo rotatorio

M P Garcia Escobar<sup>1</sup>, E J Espinosa Cardenal<sup>1</sup> and E Vera López<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: marceladelpilar.garcia@uptc.edu.co

**Abstract.** Fouling is a common problem in different industries where the solubility of dissolved minerals in water changes leading to the formation of deposits on the surface of the equipments, for example in the oil production the scale can to be formed in the wellbore, in the well tubing or superficial facilities. In the last years several studies have been carried out to determine the effect of operational conditions in the growth of the scale but there are no conclusive results. This paper presents the results of deposition of calcium carbonate on the surface of stainless steel AISI 316 at 71°C and the influence of flow velocity on the quantity and morphology of the generated scale. The tests were realize using a rotating cylinder electrode and the by means of X-ray Diffraction (DRX) and Scanning Electron Microscopy (SEM) of scale obtained was analyzed. The results show that the amount of scale formed changes with respect to the velocity of the fluid, as well as the morphology of the deposited crystals.

**Resumen.** Las incrustaciones son un problema común en diferentes industrias en las que la solubilidad de los minerales disueltos en el agua cambia provocando la formación de depósitos en la superficie de los equipos, por ejemplo, en la producción de petróleo se puede formar la incrustación en el pozo, en la tubería o en las instalaciones de superficie. En los últimos años se han realizado varios estudios para determinar el efecto de las condiciones operacionales en la formación de la incrustación, pero no hay resultados concluyentes. Este trabajo presenta los resultados de la deposición de carbonato de calcio en la superficie del acero inoxidable AISI 316 a 71°C y la influencia de la velocidad de flujo sobre la cantidad y morfología del depósito generado. Las pruebas se realizaron utilizando un electrodo de anillo rotatorio y la incrustación obtenida se analizó mediante la difracción de rayos X (DRX) y la microscopía electrónica de barrido (SEM). Los resultados muestran que la cantidad de incrustación que se forma cambia con respecto a la velocidad del fluido, así como la morfología de los cristales depositados.

## Correlation between the thermal performance and the microstructure of the material used in medium and high voltage transformer

## Correlación entre el desempeño térmico y la microestructura del material usado en borneras de transformadores de media y alta tensión

S P Vera Monroy<sup>1</sup> and Y J Salas Sarmiento<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Manuela Beltrán, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Universidad INCCA de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: [sulma.vera@docentes.umb.edu.co](mailto:sulma.vera@docentes.umb.edu.co)

**Abstract.** In Colombia, energy companies neglect the distribution that represents the main and most valuable process, presenting shortcomings in prevention and forecasting programs, using contractors who perform corrective maintenance of the components without guaranteeing the quality and performance of the materials. Within the process, the terminals determine the effective connection between the voltage line and the transformer, which have faults that are evidenced by the thermal deterioration of the material. In this work, a diagnosis of the thermal performance of these components was carried out and it was correlated with the microstructure, observing variations of the working temperature, with a thermography camera, for three types of terminals, which were classified by X-ray fluorescence in brass Z20, Z40 and Z60, and for two types of connection, copper and aluminum. The microstructure results showed that copper is the conductor that degrades the terminals faster, evidencing cracking of the material; on the other hand, the Z40 brass was the most stable with the lowest temperature variation regardless of the conductor diameter; however, in all cases the behavior of higher temperature to lower caliber is satisfied.

**Resumen.** En Colombia, las empresas de energía descuidan la distribución que representa el principal y más valioso proceso, presentado falencias en programas de prevención y predicción, recurriendo a contratistas que realizan el mantenimiento correctivo de los componentes sin garantizar la calidad y el desempeño de los materiales. Dentro del proceso, las borneras determinan la conexión eficaz entre la línea de tensión y el transformador, las cuales presentan fallas que se evidencian por el deterioro térmico del material. En este trabajo se realizó un diagnóstico del desempeño térmico de estos componentes y se correlacionó con la microestructura, observando variaciones de la temperatura de trabajo, con una cámara termografía, para tres tipos de borneras, que por fluorescencia de rayos X se clasificaron en latón Z20, Z40 y Z60, y para dos tipos de conexión, cobre y aluminio. Los resultados de microestructura mostraron que el cobre es el conductor que degrada más rápido las borneras, evidenciando agrietamiento del material, por otro lado, el latón Z40 fue el más estable al presentar la menor variación de temperatura sin importar el diámetro del conductor; sin

embargo, en todos los casos se cumple con el comportamiento de mayor temperatura a menor calibre.

## Evaluation of corrosion inhibitor simulating conditions of operation

## Evaluación de inhibidor de corrosión simulando condiciones de operación

O Gómez<sup>1</sup>, E Vera López<sup>1</sup>, Y Pineda Triana<sup>1</sup> and H Aponte Betancur<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: gomezoscarjavier@hotmail.com

**Abstract.** Operating conditions at the head of oil wells are critical, in addition to injecting water to increase the pressure while maintaining production, causing deterioration in the metallic structures that transport fluids. One way to maintain integrity is the injection of inhibitors which plays an important role in protecting the pipes. In this study a was obtained molecule N-Phenyl Nitron, which was evaluated by electrochemical tests Linear Polarization Resistance (LPR) and Tafel Polarization curves in a reactor controlling environments containing different dosages, pressure values, temperature and flow velocity using working electrodes tubing API N 80, the reactor was connected to a potentiostat to determine corrosion rates, allowing the analysis of the influence of each variable on the protective behavior of the inhibitor, and its efficiency against the decrease of the deterioration of the pipes. Corrosion products are analyzed by X-Ray Diffraction (XRD). Through optical microscopy, they obtain topographic maps of the surface, where it determines the morphology of the corrosion. In addition, a mathematical analysis of the independent variables is performed to evaluate the effect that it has on the efficiency of corrosion inhibition.

**Resumen.** Las condiciones de operación en cabeza de pozos petroleros son críticas, además de inyectar agua para aumentar la presión manteniendo la producción, generando deterioro en las estructuras metálicas que transportan fluidos. Una forma de mantener la integridad es la inyección de inhibidores los cuales tiene lugar importante en la protección de las tuberías. En este estudio se obtuvo una molécula N-Fenil Nitrona, la cual se evaluó por medio de pruebas electroquímicas LPR (resistencia a la polarización lineal) y curvas de polarización Tafel, en un reactor controlando ambientes que contienen diferentes dosificaciones, valores de presión, temperatura y velocidad de flujo, utilizando electrodos de trabajo tubing API N 80, el reactor se conectó a un potenciostato para determinar velocidades de corrosión, permitiendo el análisis de la influencia de cada variable sobre el comportamiento protector del inhibidor, y su eficiencia frente a la disminución del deterioro de las tuberías. Los productos de corrosión se analizan por difracción de rayos X (DRX). Por medio de microscopia óptica de obtienen mapas topográficos de la superficie, donde determina la morfología de la corrosión. Además, se realiza un análisis matemático de las variables independientes para evaluar el efecto que tiene en la eficiencia de inhibición de la corrosión.

**Surface Modification (Ion Implantation, Ion Nitriding, Sputtering, Sol-Gel, Thermal Spray, PVD, CVD) - SM**

**Modificación Superficial (Implantación Iónica, Nitruración Iónica, Sputtering, Sol-Gel, Termo Rociado, PVD, CVD) – SM**

## **Effect of surface roughness on nitriding processes by dielectric barrier discharges of carbon steel**

## **Efecto del acabado superficial en los procesos de nitruración por descargas de barrera dieléctrica de un acero al carbón**

**Y P Quiñonez Delgado<sup>1</sup>, L Arriaga Hurtado<sup>2</sup>, G Peña Rodriguez<sup>1</sup> and H J Dulce-Moreno<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica, Querétaro, México

<sup>3</sup> Foundation of Researches in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: [yenypatriciaqd@ufps.edu.co](mailto:yenypatriciaqd@ufps.edu.co)

**Abstract.** Changes in the behavior of carbon steel surfaces were determined for three different roughnesses as they were nitrided by means of a dielectric barrier discharge at atmospheric pressure. The surfaces before and after the treatment were characterized both morphologically and structurally. The techniques used were: roughness measurement, optical microscopy, SEM, EDX and electrochemical tests (Tafel and EIS). The results show differential changes depending on the type of finish, but in any case, an improvement of the resistance to corrosion.

**Resumen.** Se determinaron los cambios en el comportamiento de las superficies de aceros al carbón, para tres diferentes acabados, al ser nitrurados mediante descargas de barrera dieléctrica a presión atmosférica. Se caracterizaron tanto morfológicamente como estructuralmente las superficies antes y después del tratamiento. Las técnicas utilizadas fueron: Medida de rugosidad, microscopía óptica, SEM, EDX y ensayos electroquímicos (Tafel y EIS). Los resultados evidencian cambios diferenciales dependiendo del tipo de acabado, pero en todo caso un mejoramiento de la resistencia a la corrosión.

## Evaluation of the electrical conductivity and corrosion resistance for layers deposited via sputtering on stainless steel

## Evaluación de la conductividad eléctrica y resistencia a la corrosión para capas depositadas vía sputtering sobre acero inoxidable

Y J Salas Sarmiento<sup>1</sup>, L C Jiménez Borrego<sup>2</sup> and J C Blanco Rodríguez<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad INCCA de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia

<sup>3</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: juancblanco@uan.edu.co

**Abstract.** In some engineering applications, conductive materials are required to have a specific mechanical and electrical performance and at the same time to withstand conditions of corrosive aggression if exposed to the atmosphere or buried structures. In stainless steels, the relatively inert film on the surface, which masks it against the action of external agents such as corrosion, affects its electrical performance. A solution was found that took into account both electrical and anticorrosive performance. Specific oxide coatings were deposited on stainless steel substrates using the unbalanced magnetron sputtering process (UBM), varying the presence of oxygen in the reactive atmosphere. The coatings obtained had a thickness of approximately one micron and remarkable structural uniformity was noted. The corrosion resistance was evaluated by potentiodynamic polarization and electrochemical impedance spectroscopy in NaCl solution according to standard. The electrical resistivity was evaluated using the four-point method and yielded a diode-like behavior in several substrates, with a threshold potential in the order of volts. A slight shift in the solution resistance was found when the Nyquist plots were analyzed in the Electrochemical Impedance Spectroscopy technique with an equivalent circuit, a variation in the corrosion rate of almost 4 orders of magnitude was determined when the Potentiodynamics curves were analyzed by Tafel approximation. The data obtained and analyzed show that this type of surface modification maintains the conductivity conditions of a conductor at the interface and considerably improves the resistance to corrosion of these elements, since the coating allowed the ionic flow in the desired direction When a threshold voltage was exceeded and acted as an insulation in any other case.

**Resumen.** En algunas aplicaciones Ingenieriles se requiere para los materiales conductores un desempeño mecánico y eléctrico específico y al mismo tiempo que soporten condiciones de agresión corrosiva si están expuestos a la atmósfera o son estructuras enterradas. En los aceros inoxidables, la película relativamente inerte sobre la superficie, que lo enmascara en contra de la acción de agentes externos como la corrosión, afecta su desempeño eléctrico. Se encontró una solución que tuviera en cuenta tanto desempeño eléctrico como anticorrosivo. Se depositaron recubrimientos de óxidos específicos sobre sustratos de acero inoxidable utilizando el proceso de sputtering con magnetrón desbalanceado (UBM), variando la presencia de oxígeno en la atmósfera reactiva. Los recubrimientos obtenidos poseían un espesor aproximado de una micra y

se notó una uniformidad estructural notable. La resistencia a la corrosión se evaluó mediante polarización potenciodinámica y espectroscopia de impedancia electroquímica en solución de NaCl según norma. La resistividad eléctrica se evaluó con el método de las cuatro puntas y arrojó un comportamiento tipo diodo en varios sustratos, con un potencial umbral en el orden de los voltios. Se encontró un leve corrimiento en la resistencia de solución cuando se analizaron las gráficas de Nyquist en la técnica de Espectroscopia de Impedancia Electroquímica con un circuito equivalente, se determinó una variación en la velocidad de corrosión de casi 4 órdenes de magnitud cuando se analizaron las curvas potenciodinámicas mediante aproximación Tafel. Los datos obtenidos y analizados ponen en evidencia que este tipo de modificación superficial mantiene las condiciones de conductividad de un conductor en la interfase y mejoran considerablemente la resistencia frente a la corrosión de estos elementos, ya que el recubrimiento permitió el flujo iónico en el sentido deseado cuando se superó un voltaje umbral y actuó como un aislante en cualquier otro caso.



## Evaluation of tribological wear and erosion in coatings of diamalloy 4060NS deposited by thermal spray

## Evaluación del desgaste tribológico y la erosión en recubrimientos de diamalloy 4060NS depositados por spray térmico

S M Acuña Rodríguez<sup>1</sup>, E J Espinosa Cardenal<sup>1</sup> and C M Moreno Téllez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: sandramarcela.acuna@uptc.edu.co

**Abstract.** The present work seeks to reduce the damages caused by erosion and mechanical wear in a low carbon steel by coating it with a metal base alloy using the oxyacetylene flame thermal spray technique. To achieve this goal, the coating effect of the cobalt-chromium-silicon-tungsten carbide alloy (DIAMALLOY 4060 NS) on the mechanical and erosive wear phenomena of a conventional AISI 1020 steel was studied. The coating was deposited with two different pressures in the feed gases of torch, obtaining a fuel flame and a neutral one. Three coating thicknesses ranging from 200-500 $\mu$ m were used, depending on the number of deposited layers, using a Castolin Eutectic spray gun. The characterization of the powder and substrate was performed using X-ray diffraction (XRD), X-ray fluorescence (FRX), scanning electron microscopy (SEM), thermo gravimetric analysis (TGA), spark emission spectroscopy and metallographic analysis. The results confirm the chemical nature and structure of the alloy powder and substrate to be used, in addition, the thermal stability of the system was verified. The adhesion evaluation of the deposited layers was carried out by the implementation of pull-off tests, according to ASTM D4541 technical rule, in order to determine the type of developed failure. The mechanical wear, was determined using a MT/60/NI microtest tribometer, while the electrochemical erosion tests were performed using an experimental unit for this purpose, confirming of this way that substrate has lower wear levels when was coated with layers of 300-400 $\mu$ m, this demonstrates that proposed methodology allow the wear process reduction of mechanical parts subjected to aggressive operating conditions.

**Resumen.** El presente trabajo busca reducir los daños causados por la erosión y el desgaste mecánico en un acero de bajo carbono recubriéndolo con una aleación de base metálica, utilizando la técnica de spray térmico por llama oxiacetilénica. Para este fin, se estudió el efecto del recubrimiento de la aleación de cobalto-cromo-silicio-carburo de tungsteno (DIAMALLOY 4060 NS), sobre los fenómenos de desgaste mecánico y erosivos de un acero convencional AISI 1020. El recubrimiento se depositó con dos diferentes presiones en los gases suministrados a la antorcha, obteniendo una llama carburante y una neutra. Se trabajaron tres espesores de recubrimiento que oscilan entre 200-500 $\mu$ m, según la cantidad de capas depositadas, haciendo uso de una pistola de proyección Castolin Eutectic. Se realizó la caracterización del polvo y el sustrato mediante técnicas de difracción de rayos X (DRX), fluorescencia de rayos X (FRX), microscopía electrónica de barrido (MEB), análisis termogravimétrico (TGA), espectroscopia de emisión de chispa y análisis metalográfico. Los resultados confirman la naturaleza química y la

estructura del polvo de la aleación y del sustrato a utilizar, además, se verificó la estabilidad térmica del sistema. La evaluación de la adherencia de las capas depositadas se realizó mediante la implementación de pruebas pull-off según norma ASTM D4541, con el fin de determinar el tipo de falla que se presenta. El desgaste mecánico se determinó con el uso de un tribómetro micro test MT/60/NI, mientras las pruebas electroquímicas de erosión se realizaron haciendo uso de una unidad experimental adecuada para este fin, confirmando que el sustrato presenta niveles de desgaste más bajos cuando se recubre con capas de entre 300-400 $\mu$ m, demostrando que la metodología implementada permite reducir el proceso de desgaste de piezas mecánicas sometidas a condiciones de operación agresivas.

## Measurement of the energy characteristics of the titanium ion flux from a vacuum arc evaporator

## Medición de las características energéticas del flujo de iones de titanio producidos por un evaporador de arco en vacío

F F Parada Becerra<sup>1</sup>, V Dougar-Zhabon<sup>1</sup>, E A Orozco Ospino<sup>1</sup>, E D V-Niño<sup>1,2</sup> and P A Tsygankov<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia

<sup>3</sup> Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Email: tsyg@bmstu.ru

**Abstract.** The vacuum arc evaporator is a high-performance source of vapour of highly ionized material species and widely used in thin film coating technologies. The energy of the ion flux arriving at the substrate is the determining factor affecting the coating quality and adhesion. The ion energy distribution functions in the flow from a vacuum evaporator with a titanium cathode for various operating modes were experimentally measured, including a hybrid discharge mode - the mode of a joint operation of the evaporator and plasma source ion implantation. The measurements were made by a multi-electrode grid probe using retard voltage technique. The presence of ions with an energy multiple of the discharge voltage (up to 100 eV) is shown, which is connected with the presence of multiply charged ions in the flow. The fraction of doubly ionized ions reaches 5% of the main fraction of the ionic component of the flux, and the degree of ionization of the evaporated jet exceeds 20%. Spectral-optical studies confirming the presence of multiply charged ions in the plasma are also carried out.

**Resumen.** El evaporador de arco eléctrico en vacío es una fuente de alto rendimiento para la generación de vapor de especies de material altamente ionizadas y es ampliamente utilizado en tecnologías de recubrimiento de películas delgadas. La composición energética del flujo de iones que llega al sustrato es el factor determinante que afecta la calidad del revestimiento y la adhesión. Las funciones de distribución de energía iónica en el flujo desde un evaporador de vacío con un cátodo de titanio para diversos modos de funcionamiento se midieron experimentalmente, incluyendo un modo de descarga híbrida, el modo de operación conjunta del evaporador y la implantación de la fuente de plasma. Las mediciones se realizaron mediante una sonda de rejilla multielectrodo utilizando la técnica de voltaje retardado. Se muestra la presencia de iones con un múltiplo de energía de la tensión de descarga (hasta 100eV), que está conectada con la presencia de iones de carga múltiple en el flujo. La fracción de iones doblemente ionizados alcanza el 5% de la fracción principal del componente iónico del flujo, y el grado de ionización del flujo evaporado supera el 20%. También se realizan estudios espectrales-ópticos que confirman la presencia de iones de carga múltiple en el plasma.

## **Modification with titanium nitride (TiN) in the surface of the material used in the internal combustion engines manufacturing**

## **Modificación con nitruro de titanio (TiN) en la superficie del material utilizado en la fabricación de motores de combustión interna**

**V J Salazar Chaparro<sup>1</sup>, K T Ortega Bermúdez<sup>1</sup>, I González Jaimes<sup>1</sup>, H A Estupiñan Duran<sup>2</sup>, I Fernández<sup>3</sup> and E D V-Niño<sup>4,5</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

<sup>3</sup> Nano4Energy, Madrid, España

<sup>4</sup> Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia

<sup>5</sup> Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España

Email: v.juliansal@gmail.com

**Abstract.** The wear caused by the contact between the piston rings and the jacket is a phenomenon that greatly contributes to the loss of power that occurs in an internal combustion engine. For this reason, several companies or research institutes are studying the influence of wear on the efficiency of a thermal engine and proposing alternative solutions to increase the service life of the contact surfaces. According to the above, titanium nitride (TiN) was deposited in the material used in the manufacture of the linings of an internal combustion engine by means of high power magnetron (HIPIMS) spraying. The experiment was performed in a pin-on-disk configuration tribometer and the surface evaluation parameters along with the dimensions of the test specimens were established according to ASTM G-99. The morphology and the percentage variation in composition of the surface elements of the TiN coated and uncoated surfaces were analyzed before and after being abraded using Scanning Electron Microscopy (SEM) and Dispersive Energy Spectroscopy).

**Resumen.** El desgaste ocasionado por el contacto entre los anillos del pistón y la camisa, es un fenómeno que contribuye ampliamente en la pérdida de potencia que se presenta en un motor de combustión interna. Por tal motivo, diversas empresas o institutos de investigación se encuentran estudiando la influencia del desgaste en la eficiencia de un motor térmico y proponiendo soluciones alternativas de incrementar la vida útil en servicio de las superficies de contacto. De acuerdo a lo anterior, en el presente trabajo de investigación se depositó, mediante la pulverización por magnetron de alta potencia (HIPIMS), nitruro de titanio (TiN) en el material utilizado en la fabricación de las camisas de un motor de combustión interna. El experimento se realizó en un tribómetro de configuración perno sobre disco (pin on disk) y los parámetros de evaluación superficial junto con las dimensiones de las probetas, se establecieron según la norma ASTM G-99. La morfología y la variación porcentual en composición de los elementos presentes en la superficie de las superficies con y sin recubrimiento de TiN fueron analizadas

antes y después de ser desgastadas mediante las técnicas de Microscopía Electrónica de Barrido (MEB) y Espectroscopía de Energía Dispersiva (EDS).

# Nanostructured portable system of water pre-treatment for in situ sensing devices

## Sistema portable nanoestructurado de pre-tratamiento de agua para dispositivos de sensado in situ

Y C Reyes Roa<sup>1</sup> and E E González Jiménez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia

Email: yreyes@javeriana.edu.co

**Abstract.** In measurement and detection tasks in situ of pollutants in water, making use of nanosensors or portable systems, the samples under analysis include as much particulate material as biologic and chemistry agents that interfere with the measuring registers of interest analytes. In this work and since abilities that the nanotechnology offers, it is submitted the development of a portable system, inexpensive and autonomous for eliminating selectively about the water samples under measurement in situ by portable measurement system (such as voltamperometry, superficial plasmon resonance, calorimetry and other technologies) all agents and particulate material that can generate interference in the sensing pertinent records. The system has, a filter based in vegetable fiber with storage capacity of particle material and biologic agents, a nanostructured filter for controlling selectivity the passage of unwanted ions in the sample. This system can be an essential component for high sensitivity sensing and control devices where the solvent in which the located analyte is required for being free of impurities or ions that may affect the measurement.

**Resumen.** En tareas de detección y medición in situ de contaminantes en agua haciendo uso de nano sensores o sistemas portables de medición, las muestras bajo análisis contienen una gran variedad de material particulado, así como agentes biológicos y químicos que interfieren con los registros de medición de los analitos de interés. En este trabajo y desde las capacidades que ofrece la nanotecnología, se presenta el desarrollo de un sistema portable, económico y autónomo para eliminar selectivamente de las muestras de agua bajo medición in situ por sistemas de medición portable (basados en voltamperimetría, plasmón superficial, colorimetría u otras tecnologías), todos los agentes y material particulado que puedan generar interferencia en los registros correspondientes. El sistema presenta un filtro basado en fibra vegetal con capacidad de retención de material particulado y agentes biológicos. Además, cuenta con un filtro nanoestructurado que permite controlar de manera selectiva el paso de iones no deseados en la muestra. Este sistema se proyecta como un componente esencial que puede formar parte de dispositivos de control y sensado de alta sensibilidad en los que se requiere que el solvente donde se encuentra el analito, esté libre de impurezas o iones que puedan afectar la medida.

## Optimization of the parameters for obtaining zirconium-alumina coatings, elaborated by thermal spraying flame, from results of numerical simulation

## Optimización de los parámetros para obtener recubrimientos de circonia-alúmina, elaborados mediante proyección térmica por llama, a partir de los resultados de simulación numérica

M Y Ferrer Pacheco<sup>1</sup>, F Vargas Galvis<sup>2</sup> and G Peña Rodríguez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

Email: marthayasmidfp@ufps.edu.co

**Abstract.** The values of K-Sommerfeld (K) and percentage of melting (%F) obtained by numerical simulation using the jets et poudres software were used to find the parameters projection of zirconia-alumina coatings by thermal spraying flame, in order to obtain coatings with good morphological and structural properties to be used as thermal insulation. It was determined that the type of flame (neutral, oxidant and superoxidant) as well as the projection distance (8, 9 and 12cm) influences the dimensionless number of K-Sommerfeld and the percentage of melting. For coatings obtained with superoxidant flame at a projection distance of 10cm, the K-Sommerfeld value varies between 48 and 57. For the coatings obtained with superoxidant flame at a projection distance of 10cm, the K-Sommerfeld value varies between 48 and 57, which predicts a homogeneous structure of the coating considering that if  $K=0$  there is a high content of particles partially fused and if  $K>75$ , many splashes in the shape of a flower, resulting in an uneven layer. The coatings obtained under this condition have a uniform morphology, low porosity and high hardness with respect to those obtained with the other conditions.

**Resumen.** Los resultados del valor K-Sommerfeld (K) y del porcentaje de fusión (%F) obtenidos mediante la simulación numérica con el software jets et poudres, se utilizaron para encontrar los parámetros de proyección de recubrimientos de circonia-alúmina mediante proyección térmica por llama, con el fin de obtener recubrimientos con buenas propiedades morfológicas y estructurales para ser utilizados como aislantes térmicos. Se determinó que tanto el tipo de llama (neutra, oxidante y súperoxidante), como la distancia de proyección (8, 9 y 12cm) influyen sobre el número adimensional de K-Sommerfeld y el porcentaje de fusión. Para recubrimientos obtenidos con llama superoxidante a una distancia de proyección de 10cm, el valor K- Sommerfeld varía entre 48 y 57, lo que predice una estructura homogénea del recubrimiento teniendo en cuenta que si  $K=0$  existe un alto contenido de partículas parcialmente fundidas y si  $K>75$  se producen muchas salpicaduras, dando lugar a una capa poco uniforme. Los recubrimientos obtenidos bajo ésta condición presentan una morfología uniforme, baja porosidad y alta dureza con respecto a los obtenidos con las otras condiciones.

## Projection parameters of zirconia-alumina-ceria coatings made by thermal projection of oxyacetylene, based on numerical simulation

## Parámetros de proyección de recubrimientos de circonalúmina-ceria elaborados por proyección térmica oxiacetilénica, a partir de simulación numérica

L F Rodríguez Wilches<sup>1</sup>, F Vargas Galvis Fabio<sup>2</sup>, M Y Ferrer Pacheco<sup>3</sup> and G Peña Rodríguez<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Colegio Santo Ángel de la Guarda, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

<sup>3</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

Email: luisfranciscorw@ufps.edu.co

**Abstract.** A numerical simulation was performed with the software Jets et Poudres. The results allowed to choose the parameters to deposit zirconia-alumina-ceria coatings of different composition on substrates of red clay, by thermal spraying with the oxyacetylene flame to obtain homogeneous coatings with good adhesion to the substrate. The effect of the projection distance (7, 10 and 12cm) between the substrate and the torch, the percentage of particle fusion and the K-Sommerfeld number were determined. This number is dimensionless and is affected by the projection distance and by the chemical composition of the particles. For a projection distance of 9cm, the percentage of fusion of the particles varies between 57% and 91%, and the K-Sommerfeld number between 31.7 and 34.5 for the different compounds, this makes possible to obtain uniform coatings with good wettability and, therefore, good adhesion to the substrate, while for the distance of 7cm the percentage of fusion it varies between 22% and 38%, due to the short residence time of the particles in the flame which causes low adhesion. On the other hand, when the projection distance is 12cm the particles do not have sufficient kinetic energy to reach the substrate and therefore the coating is not deposited.

**Resumen.** Se realizó una simulación numérica con el software Jets et Poudres. Los resultados permitieron escoger los parámetros para depositar recubrimientos de circonalúmina-ceria de diferente composición sobre sustratos de arcilla roja, mediante proyección térmica por llama oxiacetilénica, con el fin de obtener recubrimientos homogéneos y con buena adhesión al sustrato. Se determinó el efecto de la distancia de proyección (7, 10 y 12cm) entre el sustrato y la antorcha, sobre el porcentaje de fusión de las partículas y el número K-Sommerfeld. Dicho número es adimensional y es afectado por la distancia de proyección y por la composición química de las partículas. Para una distancia de proyección de 9cm el porcentaje de fusión de las partículas varía entre el 57% y el 91%, y el número K-Sommerfeld entre 31.7 y 34.5 para los diferentes compuestos, lo que permite obtener recubrimientos uniformes con buena mojabilidad y por lo tanto buena adherencia al sustrato, mientras que para la distancia de 7cm el porcentaje de fusión varía entre el 22% y 38%, debido al poco tiempo de residencia de las partículas en la llama lo que ocasiona una baja adherencia, por otra parte cuando la distancia de proyección es de



12cm las partículas no tienen la energía cinética suficiente para alcanzar el sustrato y por lo tanto el recubrimiento no se deposita.

## Sputtering of the 1020 AISI steel in abnormal glow discharge

### Pulverización catódica del acero AISI 1020 en la descarga luminiscente anormal

A Sarmiento Santos<sup>1</sup> and J A García Zúñiga<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: armando.sarmiento@uptc.edu.co

**Abstract.** In all material treated in abnormal glow discharge (AGD) the phenomenon of sputtering occurs. In this work, we study the sputtering suffered at different temperatures by AISI 1020 steel subjected to a DC discharge in two types of atmospheres. The steel samples were previously sanded until obtaining mirror brightness and subjected to the AGD plasma in the gaseous atmospheres of H<sub>2</sub> and Ar. The temperature for each sputtering process was set in the range of 420°C to 600°C. In these samples, the mass variation was measured and the yield sputtering processes was determined. Next, the simulation of the sputtering process was performed in the SRIM 2008 software (TRIM), by adjusting sputtering yield computational computations to those experimentally measured, in order to determine the energy with which the responsible ions of the sputtering collide with studied target.

**Resumen.** En todo material sometido a la descarga luminiscente anormal (DLA) se presenta el fenómeno de pulverización catódica. En este trabajo se estudia la pulverización catódica presente a diferentes temperaturas por el acero AISI 1020 sometido a una descarga luminiscente en DC en dos tipos de atmósferas. Las muestras de acero fueron previamente lijadas hasta conseguir brillo de espejo y sometidas al plasma de la DLA en atmósferas gaseosas de H<sub>2</sub> y Ar. La temperatura para cada proceso de pulverización catódica se fijó en el rango entre 420°C y 600°C. A dichas muestras se midió la variación de masa y se determinó el rendimiento del proceso de pulverización catódica. Seguidamente se realizó la simulación del proceso en el software SRIM 2008 (TRIM), ajustando los cálculos computacionales del rendimiento de la pulverización catódica a los medidos experimentalmente, para así poder determinar la energía con que los iones responsables de la pulverización catódica chocan con el blanco estudiado.

## Synthesis of a-C:H layer via chemical vapor deposition

## Síntesis de una película de a-C:H vía deposición química en fase vapor

H A Esquivel Puentes<sup>1</sup>, T Fisher<sup>2</sup> and J J Olaya<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Purdue University, West Lafayette, United States of America

Email: haesquivelp@unal.edu.co

**Abstract.** This study investigates the synthesis of a layer of a-C:H. The upper layer of a-C:H was deposited using a microwave chemical vapor deposition system with a mixture of H<sub>2</sub>+CH<sub>4</sub> as the precursor gas, a self-bias voltage of -200V was applied during deposition. The interlayer was obtained using a radio frequency sputtering system and consists of a thin film of ZrO<sub>2</sub>, using a YSZ target that has been doped with Si in the area of greatest erosion to improve adhesion and deposit rate at the time of generating the layer of a-C:H. The deposition of the a-C:H film with the interlayer was performed on silicon substrates. The chemical composition was characterized using energy dispersive X-ray spectroscopy (EDS) and their respective molecular chemical structure was analyzed using Raman spectroscopy. Morphology was known using Atomic Force Microscopy (AFM) and Scanning Electron Microscopy (SEM). The compressive stress of the film was determined by the Stoney equation using profilometer, an approximation of the H content of the film based on Raman spectrometry was obtained.

**Resumen.** Este estudio investiga la síntesis de una capa de a-C:H. La capa superior de a-C:H fue depositada usando un sistema de deposición química en fase vapor por microondas, con una mezcla de H<sub>2</sub>+CH<sub>4</sub> como gas de aporte, se aplicó un voltaje de autopolarización BIAS de -200V durante el depósito. La intercapa se obtuvo por medio de usando un sistema de Sputtering por radio frecuencia y consiste en una película delgada de ZrO<sub>2</sub>, utilizando un blanco de YSZ que ha sido dopada con Si en la zona de mayor erosión para mejorar la adherencia y la tasa de depósito al momento de generar la capa de a-C:H. El depósito de la película de a-C:H con la intercapa se realizó sobre substratos silicio. La composición química se caracterizó utilizando EDS y su respectiva estructura química molecular se analizó utilizando espectroscopia Raman. La morfología se conoció utilizando microscopia de fuerza atómica (AFM) y microscopia electrónica de barrido (SEM). El stress compresivo de la película fue determinado por la ecuación de Stoney por medio de perfilometría, se obtuvo una aproximación del contenido de H de la película basado en la espectrometría Raman.

## Wear and corrosion behavior of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-45% TiO<sub>2</sub> coatings produced by flame thermal projection

## Comportamiento al desgaste y a la corrosión de recubrimientos de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-45% TiO<sub>2</sub> elaborados por proyección térmica por llama

M Forero Duran<sup>1</sup>, F Vargas Galvis<sup>2</sup>, M Y Ferrer Pacheco<sup>1</sup> and H J Dulce-Moreno<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

<sup>3</sup> Foundation of Researches in Science and Technology of Materials, Colombia

Email: myriamfd@ufps.edu.co

**Abstract.** The wear resistance and the corrosion behavior of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-45% by weight TiO<sub>2</sub> coatings, produced by flame thermal spraying on AISI 1020 carbon steel substrates previously coated with a Ni alloy, were evaluated. For this purpose, the parameters of thermal projection were controlled and the use of powders of similar chemical composition but different commercial reference for the ceramic layer was taken as variable. X-ray diffraction analysis and phase quantification by the Rietveld method allowed the determination of the phases and their percentage in each type of coating. SEM images were used to determine the morphology of the powders and coatings. Electrochemical techniques (Tafel and EIS) were used to evaluate corrosion protection. The coatings were subjected to wear tests with a tribometer in the ball-disk configuration. The phases present in the coatings are directly related to the behavior against corrosion and wear of them.

**Resumen.** Se evaluó la resistencia al desgaste y el comportamiento frente a la corrosión de recubrimientos de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-45% en peso de TiO<sub>2</sub> elaborados mediante proyección térmica por llama sobre sustratos de acero al carbono AISI 1020, previamente recubiertos con una aleación base Ni. Para tal efecto se controlaron los parámetros de proyección térmica y se tomó como variable el uso de polvos de similar composición química pero diferente referencia comercial para la capa cerámica. El análisis por difracción de rayos X y la cuantificación de fases por el método de Rietveld permitió determinar las fases y su porcentaje en cada tipo de recubrimiento. Las imágenes de MEB permitieron conocer la morfología de los polvos y de los recubrimientos. Para la evaluación de la protección contra la corrosión se aplicaron técnicas electroquímicas (Tafel y EIS). Los recubrimientos fueron sometidos a pruebas de desgaste con un tribómetro en la configuración bola-disco. Se determinó que las fases presentes en los recubrimientos están directamente relacionadas con el comportamiento frente a la corrosión y al desgaste de los mismos.

## **Wear evaluation of flank in burins of steel HSS implanted with nitrogen and titanium ions**

## **Evaluación del desgaste de flanco en buriles de acero HSS implantados con iones de nitrógeno y titanio**

**J E Caballero Prieto<sup>1</sup> and E D V-Niño<sup>2,3</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

<sup>2</sup> Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Colombia

<sup>3</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: jorgecaballero@ufps.edu.co

**Abstract.** In the present research, was carried out by means of repetitive tests of dry finish turning of bars of AISI/SAE 1045 steel, the evaluation of the wear resistance of flanks in modified and non-surface modified burins with nitrogen (N) and titanium (Ti) ions. The useful half-life in service of the burins (with and without Ti and N ions) was evaluated according to ISO 3685: 1993, where it was found that during the chip removal the wear of flank of the burins implanted with Ti and N ions contributed an increase in wear resistance in compared to those used as reference.

**Resumen.** En el presente trabajo de investigación se realizó, por medio de ensayos repetitivos de torneado de acabado en seco del acero AISI/SAE 1045, la evaluación de la resistencia al desgaste de flanco en buriles modificados y no modificados superficialmente con iones Nitrógeno (N) y Titanio (Ti). La vida media útil en servicio de los buriles (con y sin iones de Ti y N) fue evaluada según la norma ISO 3685: 1993, donde se encontró que durante el arranque de viruta el desgaste del flanco implantado con iones de Ti y N aportó un incremento de la resistencia al desgaste de los buriles respecto a los utilizados como referencia.

## **Thin Films and Nanomaterials - TFN**

## **Películas Delgadas y Nanomateriales – TFN**

## Aharonov-Bohm effect on the exciton spectra in type-II nanocones

### Efecto de Aharonov-Bohm sobre el espectro del exciton en nanocones de tipo II

L F García<sup>1</sup>, J Sierra<sup>2</sup>, M Herrera<sup>2</sup> and I Mikhailov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de Magdalena, Santa Marta, Colombia

Email: lfragar@gmail.com

**Abstract.** We study spectral properties of heavy-hole exciton captured by a type-II InP nanocone surrounded by the GaAs matrix. In such structure, the hole is located outside the nanocone and within a narrow ring that encompasses the antidot, bound to the electron confined in the QD via Coulomb attraction. Assuming that the effective mass of the hole is essentially larger than of the electron, we solve the corresponding two-particle Schrödinger equation by using the adiabatic approximation. Obtained solution allows us to analyze the alteration of the spatial probability distribution of the electron and the hole, the period of the Aharonov–Bohm oscillations of the energy levels and the magnetic moment as functions of the external magnetic field, applied along the symmetry axis. We show that the diamagnetic confinement provided by the magnetic field forces the hole to climb along the cone’s border, inducing so the electric polarization of the structure. Our theoretical analysis reveals the possibility of the electric polarization induced by the external magnetic field in type-II semiconductor nanocone structure related to the effect of the quantum-size confinement.

**Resumen.** Estudiamos propiedades espectrales de un excitón de hueco pesado capturado por un nanocono de InP de tipo II rodeado por una matriz de GaAs. El nanocono presenta un “antídoto” para el hueco, situado fuera del nanocono y, siendo atraído por el electrón ubicado en el QD, está además confinado dentro de un estrecho anillo que abarca el borde lateral del nanocono. Suponiendo que la masa efectiva del hueco es esencialmente mayor que la del electrón, resolvemos la correspondiente ecuación de Schrödinger de dos partículas usando la aproximación adiabática. La solución obtenida permite analizar las alteraciones que sufren las distribuciones de probabilidades espaciales del electrón y del hueco, el período de las oscilaciones Aharonov-Bohm de los niveles de energía y del momento magnético bajo aplicación a lo largo del eje de simetría de un campo magnético externo. Se muestra que el confinamiento diamagnético proporcionado por el campo magnético, obliga al hueco a escalar a lo largo del borde del cono, induciendo así la polarización eléctrica de la estructura. Nuestro análisis teórico revela la posibilidad de la creación de una polarización eléctrica permanente, inducida por el campo magnético externo en una estructura de nanocono semiconductor de tipo II, relacionada con el efecto de tamaño cuántico.

## Deposition and characterization of MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub> thin films obtained by magnetron sputtering for solid lubrication applications on industrial parts

## Obtención y caracterización de recubrimientos de MoS<sub>2</sub> y WS<sub>2</sub> obtenidos por magnetron sputtering utilizados como lubricantes sólidos en piezas industriales

J M González<sup>1</sup>, C Amaya<sup>1</sup>, I C Ortega<sup>2</sup>, I C Arango<sup>1</sup> and H Sánchez Sthepa<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Servicio Nacional de Aprendizaje, Cali, Colombia

<sup>2</sup> Universidad del Valle, Cali, Colombia

Email: [jmgonzalez43@misena.edu.co](mailto:jmgonzalez43@misena.edu.co)

**Abstract.** Solid lubricants reduce friction and wear when applied in environments where liquid conventional lubricants properties reduce, such as high and low temperatures, high or low pressure, high radiation doses, applications where access and maintenance are difficult or when the use of the liquid is non-viable as in aerospace industry. In this research MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub> thin films were deposited using DC magnetron sputtering from stoichiometric cathodes for both materials. Elemental chemical composition and crystalline structure were studied, obtaining hexagonal structures with low resistant to shear stress, which promotes the reduction of the friction and the wear. Superficial roughness was determined by contact profilometry, which showed random distributions with Gaussian morphology and variation indexes Rq/Ra higher than 1.25. Superficial nanohardness, obtained by instrumented nanoindentation showed low values, which are in agreement with previous works and is typical of solid lubricants with hexagonal crystalline structure. Friction coefficient obtained by pin on disc, showed low values in the initial stages of the tests, with adhesion as predominant wear mechanism. However, when time goes by wear and friction increases due to a combination of tribo-oxidation and the increase of abrasion wear. Tribological properties of the materials indicate that is necessary to modify the material chemical composition in order to stabilize and reduce tribo-oxidation.

**Resumen.** Los lubricantes sólidos permiten reducir la fricción y el desgaste de piezas en ambientes donde los lubricantes líquidos pierden sus propiedades, tales como altas o bajas temperaturas, altas o bajas presiones, altas dosis de radiación o en aplicaciones donde el acceso y mantenimiento se dificultan o donde la utilización de líquidos sea inviable como la industria aeroespacial. En el presente trabajo se depositaron recubrimientos de MoS<sub>2</sub> y WS<sub>2</sub> utilizando magnetron sputtering DC, utilizando blancos estequiométricos de ambos compuestos. Se determinó la composición química elemental y estructura cristalina, observando estructuras hexagonales con baja resistencia a los esfuerzos de corte, las cuales propician la reducción de la fricción y el desgaste. La rugosidad fue determinada utilizando perfilometría de contacto, la cual mostró distribuciones aleatorias tipo gaussianas, con índices de variación Rq/Ra mayores a 1.25. La nanodureza de la superficie, obtenida por nanoindentación instrumentada mostró valores



bajos, típicos de lubricantes sólidos que poseen estructuras cristalinas hexagonales. El coeficiente de fricción, obtenido por medio de pin sobre disco, mostró valores bajos en los ciclos iniciales, con un mecanismo de desgaste predominantemente adhesivo, sin embargo, con el paso del tiempo se incrementa el desgaste debido a fenómenos combinados de tribo-oxidación e incremento del desgaste abrasivo. Las propiedades tribológicas del material indican que es necesario modificar la composición química de los materiales, con el fin de estabilizar el compuesto y reducir la tribo-oxidación.

## Design and evaluation of a biosand filter in the removal of total coliforms for the treatment of surface waters of human consumption

## Diseño y evaluación de un filtro de bioarena para la remoción de coliformes totales en el tratamiento de aguas superficiales de consumo humano

M Acevedo<sup>1</sup>, G Torres<sup>1</sup>, B Verbel<sup>1</sup> and A Realpe<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

Email: macevedom@unicartagena.edu.co

**Abstract.** Biosand filters are an alternative to ensure the availability of potable water in remote locations offering the possibility of improving the quality of water consumed for marginalized populations. SSF (Slow Sand Filtration) has been used on a large scale in various water purification systems. These FBAs have been adapted also to a domestic scale due to the optimal performance, they have proven to be feasible in a wide range of measures by their reuse, easy maintenance and low costs, among others factors. The purpose of this research was to evaluate the performance of an FBA to obtain drinking water obtained from the Canal del Dique by studying the removal of total coliforms. The results of the physicochemical and microbiological analyzes of the samples of three bioarena filters with different bed heights (54.3cm, 27.1cm, 13.58cm) collected over a period of 42 days in which water of one Surface source, Canal del Dique. These results were compared using a mathematical model to verify that the reduction of bed height allowed to maintain proportional values of removals of total coliforms with respect to the time of operation, which provides a solution to the water expenditure in the investigative use of the biosand filters. The operation of the filter at intermediate scale presented good performance, that was very similar to those of the conventional filter, so it can be concluded that it is the best option to applied modifications in the FBAs due to its removal efficiency in total coliforms of 97%, that was similar to others reported studies.

**Resumen.** Los filtros de bioarena son una alternativa para asegurar la disponibilidad de agua potable en lugares apartados ofreciendo la posibilidad de mejorar la calidad del agua que consumen las poblaciones marginadas. La filtración lenta de arena o mejor conocida internacionalmente por sus siglas en inglés SSF (Slow Sand Filtration), ha sido utilizada a gran escala en diversos sistemas de potabilización de aguas. A escala doméstica también ha sido adaptada, debido a que el desempeño óptimo de estos FBA ha demostrado ser factible en una amplia gama de medidas por su reutilización, mantenimiento, economía, entre otras. El propósito de esta investigación fue la evaluación del desempeño de un FBA para la obtención de agua de consumo humano obtenida del Canal del Dique mediante el estudio de la remoción de coliformes totales. Se estudiaron los resultados de análisis físicoquímicos y microbiológicos arrojados por las muestras de tres filtros de bioarena con diferentes alturas de lecho (54.3cm, 27.1cm, 13.58cm) recogidas durante un periodo de tiempo de 42 días en los cuales se utilizó agua de una fuente superficial, Canal del Dique. Dichos resultados se compararon utilizando un

modelo matemático para poder comprobar que la reducción de altura de lecho permitía mantener remociones proporcionales de coliformes totales con respecto al tiempo de funcionamiento, lo que proporciona una solución al gasto de agua en el uso investigativo de los filtros de bioarena. El funcionamiento del filtro a escala intermedia presenta buenos resultados y comportamientos muy similares a los del filtro convencional con lo que se puede concluir que es la mejor opción para trabajar posibles modificaciones debido a su eficiencia en remoción en coliformes totales del 97%, similar a otros estudios reportados.

## Detailed study of the magnetic behaviour at low scale in $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$

## Estudio detallado del comportamiento magnetico a baja escala en $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$

J E Ordoñez<sup>1</sup>, I C Arango<sup>1</sup>, C Dominguez<sup>1</sup>, C Arango<sup>1</sup> and M E Gómez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Valle, Cali, Colombia

Email: john.ordonez@correounivalle.edu.co

**Abstract.**  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  (LSMO) is the most interesting compound of the manganite perovskite family due to its Curie temperature above room temperature that makes its remarkable physical properties desirable for practical applications as magnetic sensors. However, it is well known that the ferromagnetic properties of a material weaken in the presence of reduced dimensions. In this research, we have grown  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  thin films by sputtering DC in pure oxygen atmosphere on  $\text{SrTiO}_3$  (0 0 1) substrates at temperature of 830°C. From X-Ray Diffraction (XRD) analysis, we found the Bragg peaks for LSMO thin films only (0 0 2) peaks are observed indicating a textured growth. We have characterized morphologically samples by Atomic Force Microscopy (AFM). Additionally, LSMO thin film was patterned by lithography, the sample fabrication consists of creating a well defined channel with current and voltage leads enabling four point resistance measurements. Dependence of resistivity with temperature shows a behavior typical of this ferromagnetic system with metal-insulator transition above 300K. The devices electrical properties will be contrasted with thin film. We carried out isothermal resistance and magnetization versus applied magnetic field loops to characterize the samples. We study the dependence of magnetic transport properties with film thickness of 25nm and wire channel size (width and length) for potential applications like magnetic sensors.

**Resumen.**  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  (LSMO) es el más interesante compuesto de la familia de las manganitas, debido a que su temperatura de Curie está por encima de la temperatura ambiente, lo cual hace que sus propiedades físicas sean deseables para aplicaciones prácticas como sensores magnéticos. Sin embargo, es bien sabido que las propiedades ferromagnéticas de un material se debilitan en presencia de dimensiones reducidas. En esta investigación, se depositaron películas delgadas de  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  por sputtering DC en una atmósfera pura de oxígeno sobre sustratos de STO (0 0 1) a una temperatura de 830°C. A partir del análisis de difracción de rayos X (XRD), solamente se encontraron los picos de Bragg asociados a la dirección (0 0 2) del LSMO, indicando un crecimiento texturado. Las muestras fueron caracterizadas morfológicamente por microscopía de fuerza atómica (AFM). Adicionalmente, las películas de LSMO fueron litografiadas en forma de hilos, para permitir la medida de resistencia utilizando la técnica de las cuatro puntas. La dependencia de la resistividad con la temperatura muestra un comportamiento típico de este sistema ferromagnético con una transición Metal-Aislante por encima de 300K. Las propiedades eléctricas del dispositivo serán

contrastadas con la película delgada. Por último, se estudiará la dependencia de las propiedades de transporte en una muestra de 25nm de espesor (ancho y longitud del hilo) para sus potenciales aplicaciones en sensores magnéticos.

## Dynamic study about of molecular self-assembly over substrates Au (1 1 1) for designing nanosensors of superficial plasmon

## Estudio dinámico de auto-ensamblado molecular sobre sustratos Au (1 1 1) para diseño de nanosensores de plasmón superficial

O E Torres Ladino<sup>1</sup>, D Méndez Chaves<sup>1</sup> and E E González Jiménez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia

Email: torresomar@javeriana.edu.co

**Abstract.** It is present a model of computational simulation for studing interaction process in self-assembled molecular monolayers of alkanetiol type under metallic substrate Au (1 1 1). The Model consider mollecules like rigid bodies under browniano movement that allow to explore computationally the mechanisms of interaction and this allow computing, among others parameters, the formation times of monolayers. The derived times computationally are in agreement with those reported in scientific literatura. From results than can be derived of a model such as proposed in this work, it is make posible attendingn design tasks and development of sensors of superficial plasmon that make use of self-assembled monolayers over metallic substrate Au (1 1 1) for detection and cuantification opto-electronica of interest analytes.

**Resumen.** Se presenta un modelo de simulación computacional para estudiar procesos de interacción en autoensamblado de monocapas moleculares de tipo alkanetiol sobre sustratos metálicos Au (111). El modelo considera moléculas como cuerpos rígidos bajo movimiento browniano que permiten explorar computacionalmente mecanismos de interacción y permite computar, entre otros parámetros, los tiempos de formación de monocapas. Los tiempos derivados computacionalmente se encuentran en concordancia con los reportados en la literatura científica. A partir de los resultados que pueden ser derivados de un modelo como el propuesto en este trabajo, se hace posible asistir las tareas de diseño y desarrollo de sensores de plasmón superficial que hacen uso de monocapas autoensambladas sobre sustratos Au (1 1 1) para detección y cuantificación opto-electrónica de los analitos de interés.

## Effect of activation conditions on functional groups, textural properties and electrochemical performance of activated carbons from agricultural waste

## Efecto de las condiciones de activación sobre los grupos funcionales, propiedades texturales y desempeño electroquímico de carbones activados provenientes de residuos agrícolas

D I Arango Cárdenas<sup>1</sup>, E Arenas Castiblanco<sup>1</sup> and Z Zapata Benabithé<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia

Email: danielisidoro.arango@upb.edu.co

**Abstract.** In recent years, agricultural waste has represented an important precursor in order to produce high added value carbonaceous materials, due to their characteristic structural and physic-chemical properties natural. These properties have been taken advantages and improved through of activation processes and surface treatments, which are usually considered like an important alternative in the generation of greater added value to the agricultural sector and increased the cost/benefit ratio of new technologies where can be implemented these carbonaceous materials. Among the carbonaceous materials from agricultural residues are activated carbons (AC), which are obtained by different raw materials and production methods, providing them great variety of physical-chemical properties that allows its use in a wide range of applications, specifically, as electrode material in supercapacitors coupled in hybrid transport systems and wind turbines. In this work was carried out chemical activation of the coffe fruit endocarp and palm kernel shell with potassium hydroxide (KOH) and zinc chloride (ZnCl<sub>2</sub>) taking into account the influence of the operating conditions such as activation temperature (Tact), type of activating agent (oxidant: KOH, dehydrating: ZnCl<sub>2</sub>), impregnation mass ratio (RI=activating agent/precursor) and heating rate (VCal) on textural properties and its effect on electrochemical performance. In order to correlate the effect of operating conditions with the electrochemical performance and textural properties, activated carbons were obtained under different conditions of Tact, RI and VCal in function of the active agent type. For activation process with KOH the values Tact was 700, 800 and 850°C and RI of 2 and 4; instead, for the ZnCl<sub>2</sub>, IR remains invariant in 1 under Tact around of 550, 735 and 800°C with VCal 5 and 10°C/min for both activating agents. The textural properties were determined by elaboration of nitrogen adsorption isotherms applying the BET model for the specific surface area (ASE), the Dubinin-Radushkevich model for the mean diameter of micropore (Dmp) and micropore volume (Vmicro), the Gurvitch rule for total volume (Vt) and by difference between Vt and Vmicro, the volume of mesopores (Vmeso). The ACs' functional groups were identified by infrared spectroscopy with attenuated total reflection (FTIR-ATR) and electrochemical performance was quantified in terms of gravimetric capacity (CCP) and equivalent internal resistance (ERSEIS) by chronopotentiometry (CP) and electrochemical impedance spectroscopy (EIS), respectively, using configuration of two electrodes in H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 1M. In this work research, the best electrochemical performance approximately 50.3F/g and 1.7Ω under a current density of

0.25A/g was obtained by the activation of palm kernel shell with KOH under IR of 2 to 700°C for 1 hour and 5°C/min. This was attributed to the increasing behavior of the electrochemical performance while the ASE increased, Dmp was around 1.1 to 1.3nm, the percentage of micropores was > 92% and presence of hydrophilic functional groups was moderate respect to ACs obtained under RI of 4 and higher than activated materials with ZnCl<sub>2</sub>. Additionally, it was identified that the excessive presence of oxygenated functional groups (materials obtained under RI=4) and percentages of mesoporos > 6% in ACs, the materials' CCP was decreasing and ERSEIS remained practically constant. On the other hand, the ERSEIS of the ACs with KOH decreased as the Tact increased from 700 to 800 °C in greater proportion for RI equal to 2 than in comparison to RI of 4. However, for the process with ZnCl<sub>2</sub> and Vcal of 5 and 10 °C/min, ERSEIS was minimized all over the working temperature range from 550 (5.2Ω) to 800°C (1.5Ω). Moreover, this research allowed to identify for the case of the activation of the coffee fruit endocarp with KOH, while the ASE increased from 1000m<sup>2</sup>/g to approx. 2000 m<sup>2</sup>/g with porous structures with Vmicro/Vmeso of 9 and presence of hydrophilic functional groups was moderate (materials obtained by RI=2) respect to ACs obtained with RI of 4, the CCP y ERSEIS presented a maximum and a minimum of 49.5F/g and 3Ω, respectively. Nevertheless, in the case of KOH activation of palm kernel shell, it was identified the best electrochemical performance did not correspond to the maximum ASE (1500m<sup>2</sup>/g) obtained at 800°C, on the other hand, it presented the highest values of Vmicro/Vmes about 13 with a Dmp 1.21nm obtained at 700°C y 5°C/min. The above highlights the importance of hydrophilic surface chemistry due to presence of carboxylic, phenolic and carbonyl groups as keto, aldehyde and/or anhydride that allows a greater wettability of ASE by aqueous electrolytes and promote pseudocapacitive effects (carbonyls and phenolic) and finally a distribution of micropore size centered at 1.2nm which correspond approximately to the size of the sulfated ions solvated in aqueous media.

**Resumen.** Los residuos agrícolas han representado en los últimos años un precursor importante para la producción de materiales carbonosos de alto valor agregado, en virtud a su estructura natural y propiedades físico-químicas. Estas características son aprovechadas y mejoradas mediante procesos de activación y tratamientos superficiales, los cuales suelen ser considerados una alternativa importante para la generación de mayor valor al sector agrícola y para el mejoramiento de la relación costo/beneficio de las nuevas tecnologías en las cuales éstos puedan ser implementados. Entre los materiales carbonosos se encuentran los carbones activados (AC), los cuales, dependiendo del método de producción, se obtienen materiales con una gran variedad de propiedades físico-químicas que permiten su uso en un amplio rango de aplicaciones, específicamente, como material de electrodo en supercondensadores y baterías acoplados en sistemas de transporte híbridos y aerogeneradores. En este trabajo se realizó la activación química del casco de café y cascara de palma con hidróxido de potasio (KOH) y cloruro de cinc (ZnCl<sub>2</sub>) evaluando la influencia de las condiciones de operación tales como temperatura de activación (Tact), tipo de agente activante (oxidante: KOH; deshidratante: ZnCl<sub>2</sub>), relación másica de impregnación (RI=agente activante/precursor) y velocidad de calentamiento (VCal), sobre las propiedades texturales y su efecto sobre el desempeño electroquímico. Para correlacionar el efecto que tienen las condiciones de operación sobre el desempeño electroquímico y propiedades texturales de los ACs, la activación con KOH se realizó a Tact de 700, 800 y 850°C bajo RI de 2 y 4, y la activación con ZnCl<sub>2</sub> se realizó a Tact de 550, 735 y 800°C bajo RI de 1 a 5 y 10°C/min para ambos agentes activantes. Las propiedades texturales se determinaron mediante la construcción de isotermas de adsorción de nitrógeno aplicando el modelo BET para determinar el área superficial específica (ASE), el modelo de Dubinin-Radushkevich para determinar el diámetro medio de microporo (Dmp) y volumen de microporos (Vmicro) y la regla de Gurvitch para determinar el volumen de mesoporos (Vmeso) mediante la diferencia entre el volumen total



( $V_t$ ) y ( $V_{micro}$ ). Los grupos funcionales de los ACs fueron identificados por espectroscopia infrarroja mediante reflexión total atenuada (FTIR-ATR) y el desempeño electroquímico en términos de capacidad gravimétrica (CCP) y resistencia interna equivalente (ERSEIS), se determinó mediante cronopotenciometría (CP) y espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS), respectivamente, utilizando una configuración de dos electrodos en H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 1M. El mejor desempeño electroquímico obtenido fue 50.3F/g y 1.7 $\Omega$  bajo una densidad de corriente de 0.25A/g, que corresponde a la muestra de cuesco activada con KOH a una RI de 2 a 700°C por una 1 hora y 5°C/min. Lo anterior fue atribuido a un mayor desarrollo y un incremento del ASE, un Dmp alrededor de 1 a 1.3nm, % $V_{micro}$  > al 92% y presencia de grupos funcionales hidrófilos moderada respecto a los ACs obtenidos con RI de 4 y alta respecto a los materiales activados con ZnCl<sub>2</sub>. Por otra parte, se identificó que la presencia excesiva de grupos funcionales oxigenados (obtenidos bajo RI de 4) y % $V_{meso}$  > al 6% en los ACs, la CCP de los materiales era decreciente y la ERSEIS se conserva prácticamente constante. Además, la ERSEIS de los ACs con KOH disminuía conforme la Tact incrementaba de 700 hasta 800°C en mayor proporción para RI de 2 en comparación a RI de 4. En cambio, para el proceso con ZnCl<sub>2</sub> y  $V_{cal}$  de 5 y 10°C/min, se verificó la minimización de la ERSEIS a lo largo de todo el rango de temperaturas de trabajo desde 550 (5.2 $\Omega$ ) hasta 800°C (1.5 $\Omega$ ). Adicionalmente, esta investigación permitió identificar para el caso de la activación del cisco con KOH, que conforme el ASE incrementaba desde 1000m<sup>2</sup>/g hasta aprox. 2000m<sup>2</sup>/g con estructuras microporosas  $V_{micro}/V_{meso}$  de 9 y presencia de grupos funcionales hidrófilos moderados (obtenidos a RI=2) respecto a ACs obtenidos con RI de 4, la CCP y ERSEIS presentaron un máximo y un mínimo de 49.5F/g y 3 $\Omega$ , respectivamente, bajo una densidad de corriente de 0.25A/g. Sin embargo, para el caso de la activación del cuesco con KOH, se identificó que el mejor desempeño electroquímico no correspondió al máximo de ASE (1500m<sup>2</sup>/g) obtenida a 800°C, en cambio sí presentó el mayor  $V_{micro}/V_{meso}$  de 13 y un Dmp 1.21nm, obtenidos a 700°C y 5°C/min. Lo anterior pone en evidencia tanto la importancia de la química superficial hidrófila por la presencia de grupos carboxílicos, fenólicos y carbonilos de tipo ceto, aldehído y/o anhídrido que favorecen efectos pseudocapacitivos (carbonilos y fenoles) y una mayor mojabilidad del ASE por el electrolito acuoso, como una distribución de tamaño de microporos centrada alrededor de 1.2nm, lo cual corresponde aprox. al tamaño de los iones sulfatos solvatados en medios acuosos.

## Effect of annealing process on physical properties of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Se films

## Efecto del tratamiento térmico en las propiedades físicas de películas de Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Se

F A González Camacho<sup>1</sup>, Á M Meléndez Reyes<sup>1</sup> and D A Miranda Mercado<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: fabian.gonzalez.camacho@gmail.com

**Abstract.** Thermal treatment to semiconductor films could let to obtain better crystalline, and optical properties respect to non-treated. In this research Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Se films electrochemically deposited on titanium were obtained at finite controlled temperature. A potentiostatic setup was selected to the electrochemical deposition. To improve the structural and optical properties of the film the samples were annealed at 400°C in a nitrogen atmosphere. Non-annealed and annealed samples were characterized by X-ray diffraction spectroscopy, scanning electron microscopy, and photoluminescence. The more relevant results were the improvement into crystallinity and photoluminescence spectra of annealed samples.

**Resumen.** El tratamiento térmico a las películas delgadas puede mejorar sus propiedades cristalinas y ópticas respecto a las no tratadas. En esta investigación, películas de Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Se depositadas electroquímicamente bajo condiciones potenciostáticas a una temperatura finita fueron obtenidas. Para mejorar las propiedades ópticas y estructurales de las películas, estas fueron recocidas a 400°C en atmósfera de nitrógeno. Las muestras recocidas y no recocidas fueron caracterizadas por difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido y fotoluminiscencia. Los resultados más relevantes fueron la mejora en la cristalinidad y el espectro de fotoluminiscencia de las muestras recocidas.

## Effect of pH and chloroauric acid concentration on the geometry of gold nanoparticles obtained by photochemical synthesis

## Efecto del pH y la concentración de ácido cloroáurico sobre la geometría de nanopartículas de oro obtenidas mediante síntesis fotoquímica

G R Conde Rodriguez<sup>1</sup>, G Gauthier<sup>1</sup>, J A Sanabria Cala<sup>1</sup>, L O Ladeira<sup>2</sup> and D Laverde Cataño<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brazil

Email: gerson.rafael.conde@gmail.com

**Abstract.** Due to their excellent surface properties, gold nanoparticles have been used in a wide range of applications from optics and catalysis to biology and cancer treatment by thermal therapy. Gold nanoparticles can absorb a large amount of radiation according to their geometry, such as nanospheres and nanorods. The importance of gold nanoparticles geometry is based on the electromagnetic spectrum wavelength where exists a greater absorption of radiation, which belongs to the visible region for nanospheres and ranges between visible and near infrared regions for nanorods, conferring greater biomedical applicability to the latter. When using photochemical synthesis method, which consists of reducing gold atoms to their metallic state with UV radiation, the geometry of gold nanoparticles depends on different variables such as: 1) pH, 2) concentration of chloroauric acid, 3) the surfactant, 4) concentration of silver nitrate, 5) temperature and 6) irradiation time. Therefore, in this study the geometry of the gold nanoparticles obtained by photochemical synthesis was determined as a function of solution pH and chloroauric acid concentration, using Spectrophotometry in the Ultraviolet Visible region (UV-vis) as characterization technique. From the analysis of the UV-vis spectra, it was determined that at an acidic pH the particles have two absorption bands corresponding to nanorods geometry, while at a basic pH only nanospheres are found and at a neutral pH the lower relative intensity of the second band indicates the simultaneous existence of the two geometries. The increase in the concentration of chloroauric acid produces a decrease in the amount of synthesized nanorods, seen as a decrease of the relative intensity of the second absorption band. Therefore, obtaining gold nanoparticles with nanorods geometry favors fields such as biomedicine, because they are capable of absorbing infrared radiation and can be used as photosensitive agents in localized thermal therapy against cancer.

**Resumen.** Debido a sus excelentes propiedades superficiales, las nanopartículas de oro han sido utilizadas en un amplio rango de aplicaciones que va desde la óptica y la catálisis hasta la biología y el tratamiento del cáncer por terapia térmica. Las nanopartículas de oro tienen la capacidad de absorber una gran cantidad de radiación de acuerdo a su geometría, tales como nanoesferas y nanobastones. La importancia de la geometría de las nanopartículas de oro se fundamenta en la longitud de onda del espectro electromagnético donde se presenta mayor

absorción de radiación, la cual pertenece a la región visible para las nanoesferas y varía entre la región visible y el infrarrojo cercano para los nanobastones, confiriéndole mayor aplicabilidad biomédica a estas últimas. Cuando se emplea el método de síntesis fotoquímica, que consiste en reducir los átomos de oro a su estado metálico empleando radiación UV, la geometría de las nanopartículas de oro depende en gran medida de diferentes variables como son: 1) el pH, 2) la concentración de ácido cloroáurico, 3) el surfactante, 4) la concentración de nitrato de plata, 5) la temperatura y 6) el tiempo de irradiación. Por consiguiente, en este estudio se determinó la geometría de las nanopartículas de oro obtenidas mediante síntesis fotoquímica en función del pH de la solución y la concentración de ácido cloroáurico, empleando Espectrofotometría en la región Ultra Violeta Visible (UV-vis) como técnica de caracterización. A partir del análisis de los espectros de UV-vis, se determinó que a un pH ácido las partículas presentan dos bandas de absorción correspondientes a la geometría de nanobastones, mientras que a un pH básico se evidencia la formación exclusiva de nanoesferas y a un pH neutro la menor intensidad relativa de la segunda banda indica la existencia simultánea de las dos geometrías. El aumento en la concentración de ácido cloroáurico produce una disminución de la cantidad de nanobastones sintetizados, evidenciado en la disminución de la intensidad relativa de la segunda banda de absorción. Por lo anterior, obtener nanopartículas de oro con una geometría de nanobastones favorece campos como la biomedicina, porque éstas son capaces de absorber radiación infrarroja y pueden ser empleadas como agentes fotosensibles en la terapia térmica localizada contra el cáncer.

# Electric dipole moment of magnetoexciton in weakly coupled concentric quantum rings

## Momento dipolar eléctrico del magnetoexciton en anillos cuánticos concéntricos débilmente acoplados

L F García<sup>1</sup>, Y Revinova Svetlana<sup>2</sup> and I Mikhailov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Peoples' Friendship University of Russia, Moscow, Russia

Email: lgarcia@uis.edu.co

**Abstract.** We study exciton energies in a weakly coupled concentric quantum rings, penetrated by an axially directed magnetic flux and subjected to an electric field in the ring's plane. Actually, manufactured concentric quantum rings structures are quasi-two-dimensional, in which the carriers' tracks are mainly restricted within of one of the narrow circular-shaped regions along of the inner or the outer ring's rim. Therefore, in order to analyze the effect of the electric field, we adopt a simple model of two-particle 1D rotators with forbidden carrier's transition between inner and outer rings and with four possible different arrangements- for which the wave functions and the corresponding energies, we found by using the double Fourier series expansion method. Curves of the energies dependencies on the magnetic and electric fields have multiple intersections. The intersections between the levels provide the conditions for abrupt changes of the radial and the angular quantum numbers, which makes possible the carriers jump between rings and form a large permanent dipole moment. Our analysis reveals a possibility for controlling the electric and magnetic polarization properties of quantum rings with double rim and with trapped exciton by applying of the external electric and magnetic fields.

**Resumen.** Estudiamos las energías de los excitones en anillos cuánticos concéntricos débilmente acoplados, penetrados por un flujo magnético dirigido axialmente y sometidos además a un campo eléctrico en el plano del anillo. Las estructuras de los anillos cuánticos concéntricos reales son cuasi-bidimensionales, en los cuales las trayectorias clásicas de los portadores están encerradas principalmente dentro de una región circular estrecha a lo largo de uno de los bordes, ya sea del anillo interior o exterior. Por lo tanto, con el fin de analizar el efecto del campo eléctrico, adoptamos un modelo simple, de rotadores 1D de dos partículas con cuatro posibles diferentes configuraciones, suponiendo que las transiciones de los portadores de carga entre los anillos, interior y exterior están prohibidas. Las coordenadas radiales para este modelo se pueden separar y luego encontrar las funciones de onda y las energías correspondientes, utilizando el método de expansión en una doble serie de Fourier. Las curvas encontradas de las energías dependientes de los campos magnético y eléctrico tienen múltiples intersecciones. Las intersecciones entre los niveles proporcionan las condiciones para cambios abruptos de los números cuánticos radiales y angulares, lo que hace posible que los portadores salten entre los anillos y formen un momento dipolar permanente grande. Nuestro análisis revela la posibilidad de controlar las propiedades de polarización eléctrica y magnética de los anillos cuánticos con

doble borde y con excitones atrapados, mediante la aplicación de los campos eléctricos y magnéticos externos.

## Evaluation of the effect of nanoclays in membrane of copolymer SEPS for removal of carbon dioxide of emissions of cement industry

## Evaluación del efecto de nanoarcilas en membrana de copolímero de SEPS para la remoción de dióxido de carbono en gases emitidos por industrias cementeras

M Acevedo<sup>1</sup>, A Castro<sup>1</sup>, L Nitola<sup>1</sup>, J Ochoa<sup>1</sup> and A Realpe<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

Email: macevedom@unicartagena.edu.co

**Abstract.** Climate change is a real fact, evidenced by the increase in global temperature, that is causing several weather effects such as the melting of polar ice caps and mountain glaciers, sea level rise, changing precipitation patterns, floods, droughts, increase in frequency and intensity of natural phenomena such as hurricanes, cyclones, tornadoes and landslides. Greenhouse gases are the direct cause of global warming; if this problem persists, human displacements could increase by the droughts and hunger due to alteration in food production as a consequence of rainfall scarcity, that have been foreseen. Emissions of carbon dioxide, greenhouse gas, have been dramatically increased and the separation of gases through membrane processes is an industrial Technology applied to mitigate these emissions due to the low energy requirements and maintenance, simple design and operation without toxic reagents. This project proposes the study of polymer membranes made from styrene-ethylene-propylene-styrene (SEPS) modified with diethanolamine and nanoclays particles for the evaluation of their performance in carbon dioxide separation units that will be proposed as an instrument for the useful application in industries of cement or other types. Modified SEPS copolymer membranes were characterized using FTIR, SEM and DSC to study their molecular structure, surface and thermal behavior. The physicochemical properties such as water absorption, contact angle and porosity were applied. The sulphonation process with the addition of diethanolamine and nanoclays increases the porosity and water absorption properties by potentiating the material as a carbon dioxide separating agent.

**Resumen.** El cambio climático es un hecho real, que se evidencia por el aumento de temperatura a nivel mundial originando múltiples efectos como el derretimiento de los polos y paramos, aumento del nivel del mar, precipitaciones, inundaciones y sequías, aumento en la intensidad de fenómenos naturales como huracanes, ciclones, tornados y deslizamientos de tierra. Los gases de efecto invernadero son los causantes directos del calentamiento global, de persistir este problema se prevé desplazamientos por sequías y hambre por alteración en la producción de alimentos por la escasez de precipitaciones. Las emisiones de dióxido de carbono, gas de efecto invernadero, están en aumento y entre las tecnologías a nivel industrial para mitigar estas emisiones se encuentra la separación de gases mediante procesos con membranas, que presenta ventajas como requerimientos bajos de energía y mantenimiento, diseño simple y no uso de reactivos tóxicos. Este proyecto propone el estudio de membranas poliméricas a partir de estireno-etileno-

propileno-estireno (SEPS) modificadas con dietanolamina y nano partículas de arcilla para la evaluación de su desempeño en unidades de separación de dióxido de carbono que serán propuestas como un instrumento para la aplicación en las cementeras u otros tipos de industria que pueda serles útil. Las membranas poliméricas de SEPS modificadas fueron caracterizadas usando FTIR, SEM y DSC para estudiar su estructura molecular, superficial y comportamiento térmico. Las propiedades fisicoquímicas como absorción de agua, ángulo de contacto y porosidad fueron aplicadas. El proceso de sulfonación con adición de dietanolamina y nanoarcillas aumenta las propiedades de porosidad y absorción de agua potencializando al material como agente separador de dióxido de carbono.



## Improvement in the electrical conductivity of transparent films made with metallic nanowires

## Mejoramiento de la conductividad eléctrica en películas transparentes hechas con nanohilos metálicos

A M Bernal Forigua<sup>1</sup>, M Vega Verdugo<sup>1</sup> and A M Ardila Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: ambernal@unal.edu.co

**Abstract.** Thin films of metallic nanowires were fabricated by the Spin Coating method to use them as transparent electrodes that are widely applied in several optoelectronic devices. The film electrical properties were measured with the four point probe technique, finding sheet resistances lower than  $50\Omega/\text{sq}$ , the optical properties with transmittance measurements which gave an average value of 80% at 550nm and the morphological and structural properties with SEM. These results allowed to augur the nanostructured films as promissory candidates to replace the expensive and scarce ITO, current material used to fabricate the transparent electrodes in commercial applications. Despite these results, there are some drawbacks, for example the high contact resistance between nanowires. For this purpose, it was tried two different processes to improve the electrical contacts between nanowires, obtaining in this way as well more homogenous films without affecting its transmittance. One of the applied methods tries to weld the nanowires by heat treatment and the other by application of pressures on the surface of the films. With these methods, it was possible to decrease the sheet resistance by a magnitude of up to  $4.32\pm 1.45\Omega/\text{sq}$  with the first process and  $12.94\pm 2.45\Omega/\text{sq}$  with the second one. The results show an improvement in the electrical conductivity of the metallic nanowires films after the welding processes without affecting their transmittance.

**Resumen.** Se fabricaron películas delgadas de nanohilos metálicos por el método de Spin Coating para usarlas como Electrodo Transparente (ET) que son ampliamente aplicados en dispositivos optoelectrónicos. Las características eléctricas de las películas fueron medidas con la prueba de cuatro puntas obteniendo resistencias de hojas menores a  $50\Omega/\text{sq}$ , las ópticas con medidas de transmitancia cuyo promedio bordea el 80% en 550nm y las morfológicas y estructurales con microscopía electrónica de barrido (SEM). Los resultados obtenidos permiten augurar a estas películas nanoestructuradas como candidatas promisorias para reemplazar el costoso y escaso ITO con el que se construye actualmente los ET en aplicaciones comerciales. A pesar de los resultados, inconvenientes como la alta resistencia de contacto entre los nanohilos sigue siendo un escollo a solucionar. Para tal fin, se han probado dos métodos para mejorar el contacto eléctrico entre los nanohilos, que a su vez permitan obtener películas más homogéneas sin afectar la transmitancia de las mismas. Uno de los métodos aplicados busca soldar los nanohilos por tratamiento térmico y el otro por aplicación de presiones sobre la superficie de las películas. Con estos métodos fue posible disminuir la resistencia de hoja hasta en  $4.32\pm 1.45\Omega/\text{sq}$  con el primero y  $12.94\pm 2.45\Omega/\text{sq}$  con el segundo. Los resultados finales muestran una mejoría en

la conductividad de las películas de nanohilos metálicos tras someterlas a procesos de soldadura sin afectar la transmitancia de las películas.

## Interfacial coupling in multiferroic BiFeO<sub>3</sub> and ferromagnetic La<sub>2/3</sub>Sr<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub> thin films

### Acople de interfaz en películas delgadas del multiferroico BiFeO<sub>3</sub> y el ferromagnético La<sub>2/3</sub>Sr<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub>

E Ordoñez John<sup>1</sup>, C Dominguez<sup>1</sup>, M E Gómez<sup>1</sup> and W Lopera<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad del Valle, Cali, Colombia

Email: john.ordonez@correounivalle.edu.co

**Abstract.** Antiferromagnetic/Ferromagnetic coupling mechanics have been studying by growing successfully BiFeO<sub>3</sub>/La<sub>2/3</sub>Sr<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub> bilayers on SrTiO<sub>3</sub> single crystals by using rf and dc sputtering technique at pure oxygen pressures. To characterize the samples, we employed X-ray diffraction, magnetization as a function of the temperature and the magnetic field applied under zero field and field cooling conditions and polarization-electric field measurements. Field cooling loops evidence interfacial coupling effect when antiferromagnetic ferroelectric BiFeO<sub>3</sub> is placed in contact with ferromagnetic La<sub>2/3</sub>Sr<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub> indicate the shift of the magnetization loop to negative values of the applied magnetic field. Our samples exhibited an exchange bias of 76Oe at 5K after field cooling the sample under 5000Oe. Temperature dependence of the exchange bias field showed exponential decay. The BFO/LSMO bilayer exhibits a ferroelectric behavior ( $P_s=65\mu\text{C}/\text{cm}^2$  at 4V and 100Hz). Coexistence of ferroelectric and ferromagnetic properties in the BFO/LSMO bilayer make it a promising candidate system for applications where the magnetoelectric behavior is required.

**Resumen.** El acople antiferromagnético/ferromagnético ha sido estudiado mediante el crecimiento de bicapas de BiFeO<sub>3</sub>/La<sub>2/3</sub>Sr<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub> depositadas sobre sustratos de SrTiO<sub>3</sub> mediante la técnica de sputtering RF y DC en altas presiones de oxígeno. Para caracterizar las muestras, se empleó la técnica de difracción de rayos X, magnetización en función de la temperatura y del campo magnético bajo condiciones de campo cero (ZFC) y campo de enfriamiento (FC), además se realizaron medidas de polarización eléctrica. Las medidas de enfriamiento evidencian el efecto de acoplamiento interfacial cuando el BiFeO<sub>3</sub> se pone en contacto con el La<sub>2/3</sub>Sr<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub>, este efecto se observa cuando la histéresis magnética se desplaza hacia valores negativos de campo magnético aplicado. Las muestras exhibieron un Exchange bias de 76Oe a 5K al enfriar la bicapa con un Haplicado= 5000Oe. La dependencia de la temperatura con el campo de Exchange bias presenta un decaimiento tipo exponencial. La bicapa BFO/LSMO exhibe un comportamiento ferroeléctrico ( $P_s=65\mu\text{C}/\text{cm}^2$  a 4V y 100Hz). Por lo tanto, La coexistencia de propiedades ferroeléctricas y ferromagnéticas en la bicapa BFO/LSMO lo convierten en un sistema candidato prometedor para aplicaciones en las que se requiere el comportamiento magnetoelectrónico.

## Mesoporous silicon oxide films and its utility as a Template in obtaining nano-structured conductor polymers

## Películas mesoporosas de óxido de silicio y su utilidad como Template en la obtención de polímeros conductores nano-estructurados

R D Salgado Ordosgoitia<sup>1</sup>, J Arias<sup>2</sup> and G C Arteaga Aroyo<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Corporación Universitaria del Caribe, Sinsalejo, Colombia

<sup>2</sup> Institución Educativa Marceliano Polo, Cereté, Colombia

<sup>3</sup> Universidad del Sinú, Cartagena, Colombia

Email: rodrigo.salgado@cecar.edu.co

**Abstract.** Obtain conductive polymers (PCs) that can be applied in the manufacture of OLEDs, solar cells, electro-chromic devices, electrochemical sensors, etc.; Has been possible using chemical and electrochemical methods. The electrochemical methods have enabled the production of films of controlled thickness, according to the electrochemical technique used (Fixed Potential, Cyclic Voltammetry), obtaining positive results in different applications. However, current trends are towards the manufacture of nano-materials, so it is sought to develop and/or use methodologies that allow to obtain PCs with different morphologies such as nano-fibers, nano-tubes, nanospheres, nano-bars and nano-threads. All these morphologies have been obtained using a Template, in whose pores the material grows, with the desired dimensions, but it has been complicated the separation of the material from the mold, to be evaluated in the aforementioned applications. It is then required a Template that allows the direct evaluation of the nano-structured polymer and is where the mesoporous silicon oxide films are important, since they are also obtained electrochemically on the surface of the working electrode. The dimensions of the nano-structures obtained and the type of these, depend on the potential applied, the time of realization of the deposit, the surfactant used in the precursor mixture of the mesoporous film, as well as the electropolymerization time, the technique of Electropolymerization used, the monomer used, obtaining nano-structured polymers with dimensions ranging from 7nm to 15nm in diameter.

**Resumen.** Obtener polímeros conductores (PCs) que puedan aplicarse en la fabricación de OLEDs, celdas solares, dispositivos electro-crómicos, sensores electroquímicos, etc; ha sido posible utilizando métodos químicos y electroquímicos. Los métodos electroquímicos han posibilitado la obtención de películas de espesor controlado, de acuerdo con la técnica electroquímica utilizada (Potencial Fijo, Voltametría Cíclica), obteniendo resultados positivos en distintas aplicaciones. Sin embargo, las tendencias actuales son hacia la fabricación de nano-materiales, por lo que se busca desarrollar y/o utilizar metodologías que permitan obtener PCs con distintas morfologías como nano-fibras, nano-tubos, nano-esferas, nano-barras y nano-hilos. Todas estas morfologías se han obtenido utilizando un Template (molde), en cuyos poros crece el material, con las dimensiones deseadas, pero ha sido complicado la separación del material del

molde, para luego ser evaluado en las aplicaciones antes mencionadas. Se requiere entonces de un Template que permita la evaluación directa del polímero nano-estructurado y es donde las películas mesoporosas de óxido de silicio toman importancia, ya que también se obtienen por vía electroquímica sobre la superficie del electrodo de trabajo. Las dimensiones de las nano-estructuras obtenidas y del tipo de estas, dependen del potencial aplicado, el tiempo de realización del depósito, el surfactante utilizado en la mezcla precursora de la película mesoporosa, así como del tiempo de electro-polimerización, la técnica de electro-polimerización usada, el monómero utilizado, obteniéndose polímeros nano-estructurados con dimensiones que oscilan entre los 7nm a 15nm de diámetro.

## Microwave-hydrothermal synthesis of carbon nanostructures for functionalization with horseradish peroxidase (*armoracia rusticana*)

## Síntesis hidrotérmica asistida por microondas de nanoestructuras de carbono para su funcionalización con la enzima peroxidasa de rábano picante (*armoracia rusticana*)

S V Valcárcel Méndez<sup>1</sup>, J R Quintero Saumeth<sup>2</sup>, R Mejía-Ospino<sup>1</sup>, J Castillo León<sup>1</sup> and R Cabanzo Hernández<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia

Email: [sandra.valcarcel@correo.uis.edu.co](mailto:sandra.valcarcel@correo.uis.edu.co)

**Abstract.** Carbon Nanostructures (CNDs) are a particular group of nanomaterials made up mainly of carbon atoms, which have received special interest because of their properties optical, thermal, mechanical, electrical and structural. Furthermore, its low toxicity making them a promising material for a wide spectrum of applications. Nowadays, CNDs synthesis is done through two routes called bottom-up and top-down. The first, uses as carbon source atoms or molecules that progressively become complexed to obtain the nanostructured. The second route begins with large materials which by successive cuts reduces the dimensions until obtaining the nanostructured. Both route allow to control the size, morphology and also controls the nature of the surface thus improving its optoelectronic behavior. CNDs possess many functional groups on their surface as carboxylic acids, epoxides and hydroxyls. The presence of these groups improves its solubility in aqueous medium facilitating thus the functionalization with organic, polymeric, inorganic and biological substances. This has allowed its application in several fields as medicine, biochemistry, biotechnology, bioimaging and sensors. Precisely, in the field of sensors there are several studies which have been reported by different authors for the detection of glucose, hydrogen peroxide and different water pollutants such as heavy metals, dyes and phenolic compounds. In the field of environmental sciences, it is increasingly necessary to have analytical, with high precision and specific, fast and sensitive characteristics, in order to aromatic compounds, such as phenols. Phenols are contaminants whose chemical nature make them very stable, high water solubility, and highly toxic, environmental damage and difficult to biodegrade. In this way, most common techniques for the determination of phenolic compounds and their derivatives include high performance liquid chromatography (HPLC), capillary electrophoresis, electrochemical methods, electrogenerated chemiluminescence (ECL), chromatographic methods, among others. Despite these methods being effective in the detection of phenols, the requirement of sample pretreatment, bulky instruments and longtime analysis open the space for new analytical methods where the detection could be done in a direct and faster way. Due to the above, it is necessary the search for new analytical alternatives that allow to improve the disadvantages presented by the traditional methods. In the last years the scientific community has been interested in the fabrication of novel biosensors with properties such as easy operation, high sensitivity, selectivity and rapid response. One of the elements of biological recognition most used for the design of fluorescent biosensors, is the HRP (Horseradish

peroxidase), due to its specificity to phenols and their derivatives. The presence of oxygenated functional groups on the surface of the CNDs facilitates the functionalization with enzymes containing amino groups. The integration of HRP on the surface of CNDs probably will change the optoelectronic and photoluminescence properties which probably will convert these nanostructures in a potential detection tool for phenols. In this work, we report the microwave-hydrothermal synthesis of CNDs and its integration with HRP. Several parameters like irradiation time variations, temperature and pH of the medium were studied. Important changes in graphite oxide, were evidenced by fluorescence spectroscopy and Dynamic Light Scattering (DLS) obtaining stable CNDs, monodisperse and average particle size around 10nm, a quantum yield of 5.89% and narrow emission (FWHM) of 70nm. In addition, Raman spectrum were obtained at 532nm using a LabRam HR evolution Horiba Scientific Microscope with a CCD detector (Charge Couple Device) with UV-Vis and near Infrared wavelengths detection. The infrared spectrums were obtained in a Thermo Scientific iS50 FTIR equipment, which allowed the identification of the functional groups on the surface of the CNDs. Subsequently, the nanoparticles were dialyzed, filtered and lyophilized for functionalization with the HRP enzyme through the formation of a peptide bond. Important changes on the optoelectronic behavior of the CNDs-HRP system were observed. These changes were evaluated by steady-state fluorescence spectroscopy, UV-Vis, Raman and FT-IR spectroscopy and Dynamic Light Scattering (DLS). Finally, computational studies were carried out (Amber force field and the Gromacs program package) in order to study structural stability of the HRP enzyme functionalized with the CNDs. Finally, the functionalization of CNDs with HRP will provide a potential new and highly sensitive fluorometric method for the detection of phenol in water.

**Resumen.** Las Nanoestructuras de Carbono (CNDs) son un grupo particular de nanomateriales constituidos principalmente por átomos de carbono, las cuales han recibido un interés especial debido a sus propiedades ópticas, térmicas, mecánicas, eléctricas y estructurales. Adicionalmente tienen baja toxicidad, lo cual las convierten en un material promisorio para un amplio espectro de aplicaciones. En la actualidad, la síntesis de CNDs se realiza a través de dos rutas denominadas bottom-up y top-down. La primera, utiliza como fuente de carbono átomos o moléculas que en forma progresiva se van acomplejando hasta obtener la nanoestructura. La segunda ruta inicia con materiales de gran tamaño y mediante cortes sucesivos reduce las dimensiones hasta obtener la nanoestructura deseada. Ambas rutas permiten controlar tamaño, morfología y la naturaleza de su superficie, siendo estas características determinantes en su comportamiento optoelectrónico. Las CNDs poseen muchos grupos funcionales sobre su superficie como ácidos carboxílicos, epóxidos e hidroxilos; éstos le imparten excelente solubilidad en medio acuoso facilitando así la funcionalización con sustancias orgánicas, poliméricas, inorgánicas y biológicas. Esto ha permitido su aplicación en muchos campos como la medicina, bioquímica, biotecnología, bioimagen y sensores. Específicamente, en el campo de sensores existen muchos estudios los cuales han sido reportados por diferentes autores para la detección de glucosa, peróxido de hidrógeno y de diferentes contaminantes de agua tales como metales pesados, colorantes y compuestos fenólicos. Desde el punto de vista ambiental, es cada vez más necesario contar con herramientas analíticas cuyas características sean precisas, específicas, rápidas y sensibles con el fin de detectar compuestos aromáticos, tales como los fenoles. Los fenoles son contaminantes cuya naturaleza química los hace muy estables, solubles en agua, altamente nocivos y de difícil biodegradación. De esta manera, las técnicas más comunes para la determinación de compuestos fenólicos y sus derivados incluyen cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), electroforesis capilar, métodos electroquímicos, quimioluminiscencia electrogenerada (ECL), métodos cromatográficos, entre otros. A pesar de que estos métodos son eficaces en la detección de fenoles, el requisito de pretratamiento de

muestras, instrumentos voluminosos y análisis a largo plazo abren el espacio para nuevos métodos analíticos en los que la detección podría realizarse de manera directa y rápida. Debido a lo anterior, es necesario buscar nuevas alternativas analíticas que permitan mejorar las desventajas presentadas por los métodos tradicionales. En los últimos años la comunidad científica se ha interesado en la fabricación de nuevos biosensores con propiedades tales como fácil operación, alta sensibilidad, selectividad y de respuesta rápida. Uno de los elementos de reconocimiento biológico más utilizado para el diseño de biosensores fluorescentes, es la HRP (peroxidasa de rábano picante), debido a su especificidad hacia fenoles y sus derivados. La presencia de grupos oxigenados en la superficie de las CNDs facilita la funcionalización con enzimas que contienen grupos amino. La integración de la HRP en la superficie de las CNDs probablemente cambiará las propiedades optoelectrónicas y de fotoluminiscencia, que posiblemente convertirán estas nanoestructuras en una herramienta potencial de detección de fenoles. En este trabajo reportamos la síntesis hidrotérmica asistida por microondas de CNDs y su integración con la HRP. Se estudiaron varios parámetros como las variaciones en el tiempo de irradiación, temperatura y pH del medio. Cambios importantes en el óxido de grafito se evidenciaron por espectroscopia y dispersión dinámica de la luz (DLS) obteniendo CNDs estables, monodispersos y de tamaño de partícula promedio de alrededor de 10nm, rendimiento cuántico de fluorescencia de 5.89% y banda de emisión estrecha de 70nm. Además, se obtuvo el espectro Raman a 532nm utilizando un microscopio Raman LabRam HR evolution Horiba Scientific con un detector CDC (Charge Coupled Device) con detección de longitudes de onda del UV-Vis y el infrarrojo cercano. Los espectros infrarrojos se obtuvieron en un equipo FTIR Thermo Scientific iS50, que permitió la identificación de los grupos funcionales en la superficie de las CNDs. Posteriormente, las nanopartículas de dializaron, filtraron y liofilizaron para la funcionalización con la enzima HRP mediante la formación de un enlace peptídico. Se observaron cambios importantes en el comportamiento optoelectrónico del sistema CNDs-HRP. Estos cambios fueron evaluados mediante espectroscopía de fluorescencia en estado estacionario, espectroscopía UV-Vis, Raman y FT-IR, dispersión dinámica de la luz (DLS). Finalmente, se realizaron cálculos computacionales (usando el campo de fuerza Amber y el paquete de programas Gromacs).



## Scanning electron microscopy of heat treated TiO<sub>2</sub> nanotubes arrays obtained by anodic oxidation

## Microscopía electrónica de barrido de nanotubos de TiO<sub>2</sub> obtenidos por oxidación anódica y tratados térmicamente

D I Naranjo Zuluaga<sup>1</sup>, S I Blanco Vásquez<sup>1</sup> and S J García Vergara<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: diana.naranjo@correo.uis.edu.co

**Abstract.** Scanning electron microscopy was used to investigate the anatase-rutile transformation of self-organized TiO<sub>2</sub> nanotubes obtained on titanium foil by anodizing and subsequent heat treatment. The anodizing was carried out at 20V in an 1% v/v HF acid, ethylene glycol:water (50:50) electrolyte at room temperature. The anodized samples were initially pre-heat treated at 723K for 4 hours to modify the amorphous structure of TiO<sub>2</sub> nanotubes into anatase structure. Then, the samples were heated between 873 to 1073K for different times, in order to promote the transformation to rutile structure. The formation of TiO<sub>2</sub> nanotubes is evident by SEM images. Notably, when the samples are treated at high temperature, the formation of rutile crystals starts to become evident at the nanotubes located on the originally grain boundaries of the alloy. Thus, the anatase - rutile transformation has a close relationship with the microstructure of the alloy, more exactly with grain boundaries.

**Resumen.** En el presente trabajo se estudió por microscopía electrónica de barrido (SEM) la transformación anatasa-rutilo de nanotubos de TiO<sub>2</sub> obtenidos sobre láminas de titanio mediante anodizado y tratamiento térmico. El anodizado se realizó a 20V en una solución de 1% v/v de HF mezclada con etilenglicol:agua (50:50) a temperatura ambiente. Las muestras anodizadas fueron sometidas a un pre-tratamiento térmico inicial a 723K durante 4 horas, para modificar la estructura amorfa de los nanotubos de TiO<sub>2</sub> a anatasa. Posteriormente, las muestras fueron calentadas entre 873 y 1073K por diferentes tiempos, con el objetivo de promover la transformación de anatasa a rutilo. Las imágenes de SEM permiten confirmar la formación de nanotubos de TiO<sub>2</sub>. Se observó que, en las muestras anodizadas y tratadas a altas temperaturas, la formación de cristales de rutilo comenzó en los nanotubos ubicados sobre los límites de grano del metal. Los resultados sugieren que la transformación anatasa-rutilo podría estar estrechamente relacionada con la microestructura del sustrato, en particular con los límites de grano.

## Semiconductor behaviour and optical properties of titanium and niobium oxide thin films

## Comportamiento semiconductor y propiedades ópticas de películas delgadas de óxido de titanio y óxido de niobio

M J Pinzón Cárdenas<sup>1</sup>, L Yate<sup>2</sup> and W A Aperador Chaparro<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Centro de Investigación Cooperativa en Biomateriales, San Sebastián, España

Email: mpinzonc@ecc.edu.co

**Abstract.** Thin films of titanium oxide (TiO<sub>2</sub>), niobium oxide (Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) and titanium–niobium oxides ((Nb-Ti) O) were deposited on 316L stainless steel and common glass substrates using the RF magnetron sputtering technique in reactive configuration. With the objective of evaluate the semiconductor behavior of the films by techniques such as electrochemical impedance spectroscopy (EIS) and Mott-Schottky graphs and additionally the optical properties thereof through UV-Vis-NIR optical spectroscopy assays. In the process of analyzing the semiconductor behavior of the films the results obtained by EIS tests performed in a range between -800 and 800mV were used to identify the frequency at which the representative capacitance of the region becomes evident of exhaustion, at which the experiment will be developed to generate the Mott-Schottky graphs, from which the value of the flat band potential is obtained, with which we can calculate the number and type of load carriers in the material. On the other hand, the values of the optical constants of the material, as well as the value of the optical band gap and the dielectric function of the material were calculated from the analysis of the results obtained by optical spectroscopy tests. Beer-Lambert and the relations of Kramers-Kronig were used in order to achieve that goal.

**Resumen.** Se depositaron películas delgadas de óxido de titanio (TiO<sub>2</sub>), óxido de niobio (Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) y óxido de titanio y niobio ((Nb-Ti)O), sobre sustratos de acero inoxidable 316L y vidrio común mediante la técnica de Sputtering magnetrón RF en configuración reactiva; con el objetivo de evaluar el comportamiento semiconductor de las películas mediante técnicas tales como espectroscopia de impedancias electroquímicas (EIS) y gráficas de Mott-Schottky. Adicionalmente las propiedades ópticas de las películas se estudiaron a través de ensayos de espectroscopia óptica UV-Vis-NIR. En el proceso de análisis del comportamiento semiconductor de las películas se utilizaron los resultados obtenidos en los ensayos de EIS realizados en un rango entre -800 y 800mV, para identificar la frecuencia a la cual se hace evidente la capacitancia representativa de la región de agotamiento, y a la cual se desarrollará el experimento que permitirá generar las gráficas de Mott-Schottky, a partir de las cuales se obtiene el valor del potencial de banda plana, con el cual podremos calcular el número y tipo de portadores de carga en el material. Por otra parte, del análisis de los resultados obtenidos en los ensayos de espectroscopia óptica se calcularon los valores de las constantes ópticas del material,

así como el valor del band gap óptico y la función dieléctrica del mismo, utilizando para tal fin, la ley de Beer-Lambert y las relaciones de Kramers-Kronig.

## Structural and optoelectronic characterization of bismuth-titanium-oxygen thin films deposited on AISI 316L substrates

## Caracterización estructural y optoelectrónica de películas delgadas de bismuto-titanio-oxígeno depositadas sobre sustratos de AISI 316L

G Orozco Hernández<sup>1</sup>, E Restrepo Parra<sup>2</sup>, J J Olaya Flórez<sup>3</sup> and J E Alfonso<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad ECCI, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia

<sup>3</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: gorozcoh@ecc.edu.co

**Abstract.** Bismuth-based thin films were deposited on AISI 316L stainless steel and glass substrates via the unbalanced magnetron DC sputtering technique. Three different configurations of titanium pieces along the bismuth target race track were used in order to evaluate the influence of Ti content on the optical and electrical properties of the films. We used a reactive ambient mixture of Ar:O (80%:20%) and a constant flux of 9sccm, along with a power of 40W. Results showed thin films with high homogeneity and smooth surfaces, with several bismuth droplets, in all the different configurations. It was also found that the optical and electrical properties of the thin films are strongly dependent on the preparation conditions, especially the Ti content. Titanium quantities in the parts-per-million range were found only through the micro-proton induced X-Ray emission technique. This small quantity of Ti, as well as the thickness of the thin films, affected the electrical and optical response of the bismuth-based thin films.

**Resumen.** Se depositaron películas delgadas basadas en bismuto sobre sustratos de acero inoxidable AISI 316L y vidrio mediante la técnica de sputtering DC con magnetron desbalanceado. Se ubicaron piezas de titanio sobre la zona de mayor erosión del blanco en tres configuraciones diferentes para evaluar así la influencia del contenido de titanio en las propiedades ópticas y eléctricas de las películas. Se utilizó una atmósfera reactiva con una mezcla de gases Ar:O (80%:20%), una potencia del blanco de 40W y un flujo constante de 9sccm. Los resultados mostraron que las películas tuvieron alta homogeneidad y superficies con poca rugosidad y con algunos aglomerados de bismuto en todas las configuraciones. También se encontró que las propiedades ópticas y eléctricas de las películas dependen fuertemente de las condiciones de crecimiento especialmente el contenido de titanio. Se encontraron cantidades pequeñas de titanio en las películas, del orden de las partes por millón, y fueron halladas únicamente mediante la técnica de emisión de rayos X inducido por partículas. Estas pequeñas cantidades de titanio, así como el espesor de las películas afectaron la respuesta óptica y eléctrica de las películas delgadas basadas en bismuto.

## Synthesis of Diamond-like Carbon (DLC) protective coatings using a modified pulsed-DC PECVD deposition system

## Síntesis de recubrimientos protectores de Diamond-like Carbon (DLC) utilizando un sistema de deposición DC-pulsado PECVD modificado

G Capote<sup>1</sup>, J M Gutiérrez<sup>1</sup> and C O Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Email: gcapoter@unal.edu.co

**Abstract.** Synthesis and characterization of Diamond-like Carbon (DLC) protective coatings using a modified pulsed-DC PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) system is presented in this work. DLC films were deposited on silicon substrates using methane gas (CH<sub>4</sub>) as precursor and an asymmetrical bipolar pulsed-DC power supply. Two different configurations were used in the synthesis of the films: (1) conventional pulsed-DC PECVD system with a working pressure of 10Pa; and (2) modified system with an active screen that acts as an additional cathode with pressure of 5Pa. The films were deposited at different applied negative voltages to the substrate during growth, varying from -500V to -1000V. The microstructural properties of the coatings were determined using the Raman spectroscopy technique. The compressive stresses were calculated using profilometer and applying the Stoney equation, while the mechanical properties were obtained using the nanoindentation technique. The results showed that a combination of a modified deposition system with an active screen and a lower working pressure, allowed to obtain DLC protective coatings with a higher deposition rates, as well as with more attractive properties in terms of their microstructure and mechanical properties.

**Resumen.** En este trabajo es presentada la síntesis y caracterización de recubrimientos protectores de Diamond-like Carbon (DLC) utilizando un sistema de deposición DC-pulsado PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) modificado. Las películas de DLC fueron depositadas sobre sustratos de silicio usando el gas metano (CH<sub>4</sub>) como precursor y una fuente de tensión DC-pulsada asimétrica y bipolar. Dos configuraciones fueron empleadas en la síntesis de las películas: (1) sistema convencional DC-pulsado PECVD con una presión de trabajo de 10Pa y (2) sistema modificado con una pantalla activa que actúa como un cátodo adicional con presión de 5Pa. Las películas fueron depositadas a diferentes voltajes aplicados al sustrato durante el crecimiento, variando desde -500V hasta -1000V. Las propiedades microestructurales de los recubrimientos fueron determinadas empleando la técnica de espectroscopía Raman. Los esfuerzos compresivos fueron calculados utilizando perfilometría y aplicando la ecuación de Stoney, mientras que las propiedades mecánicas fueron obtenidas usando la técnica de nanoindentación. Los resultados obtenidos muestran que el sistema de deposición modificado con el uso de la pantalla activa y utilizando una presión de trabajo menor,

permitió obtener recubrimientos protectores de DLC con una mayor tasa de depósito, así como con propiedades más atrayentes en cuanto a su microestructura y propiedades mecánicas.

## **Systematic study of the influence of the deposit variables in the morphological and topographic properties of copper coatings obtained by the resistive thermal evaporation technique**

## **Estudio sistemático de la influencia de las variables de depósito en las propiedades morfológicas y topográficas de recubrimientos de cobre obtenidos por la técnica de evaporación térmica resistiva**

**A Avendaño<sup>1</sup>, C Piñeiro<sup>1</sup> and J Mina<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Servicio Nacional de Aprendizaje, Cali, Colombia

Email: [avendano0726@gmail.com](mailto:avendano0726@gmail.com)

**Abstract.** The present project aims to identify the changes in surface morphology and topography of Cu monolayers obtained by the Thermal Resistive Evaporation (TRE) technique as a result of changes in the process variables such as the applied current and the deposition time, in order to be able to estimate the deposition conditions for certain surface and topographic characteristics. The analysis of the morphological changes was performed through Scanning Electron Microscopy (SEM) this analysis showed consistent changes in the shape and thickness of the films as a function of the change of deposition parameters, then topographic analysis through of Atomic Force Microscopy (AFM) it were possible to observe changes in the roughness and grain size associated with the change the applied current and the deposition time, these results allowed to establish a direct relation between the deposition time and the applied current with the surface characteristics of the layers obtained in the process of obtaining copper coatings by the thermal resistive evaporation technique. The relationship obtained between the process variables and properties the surface properties will allow predicting the roughness, particle size, and thickness of copper coatings in a resistive thermal evaporation system.

**Resumen.** El presente proyecto tiene como objetivo identificar los cambios en la morfología superficial y topográfica de las monocapas de Cu obtenidas por la técnica de evaporación térmica resistiva (TRE) como resultado de cambios en las variables de proceso tales como la corriente aplicada y el tiempo de deposición. Para estimar las condiciones de deposición para ciertas características superficiales y topográficas. El análisis de los cambios morfológicos se realizó mediante microscopia electrónica de barrido (SEM). Este análisis mostró cambios consistentes en la forma y grosor de las películas en función del cambio de los parámetros de deposición, luego el análisis topográfico a través de microscopia de fuerza atómica fue posibles observar cambios en la rugosidad y tamaño de grano asociados con el cambio de la corriente aplicada y el tiempo de deposición, estos resultados permitieron establecer una relación directa entre el tiempo de deposición y la corriente aplicada con las características superficiales de las capas obtenidas en el proceso de obtención de revestimientos de cobre por la técnica de evaporación resistiva térmica. La relación obtenida entre las variables del proceso y las propiedades de las propiedades superficiales permitirá predecir la rugosidad, el tamaño de las

partículas y el espesor de los recubrimientos de cobre en un sistema de evaporación térmica resistiva.



## **Wear and Corrosion/Oxidation - WCO**

## **Desgaste y Corrosión/Oxidación – WCO**

## Effect of CO<sub>2</sub> temperature and concentration in the performance of citric acid as an inhibitor of inhibitors of CaCO<sub>3</sub>

## Efecto de la temperatura y la concentración de CO<sub>2</sub> en el comportamiento del ácido cítrico como inhibidor de incrustaciones de CaCO<sub>3</sub>

K A Blanco Buitrago<sup>1</sup>, E Vera López<sup>1</sup>, Y Pineda Triana<sup>1</sup> and H Aponte Betancur<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

Email: katherineblancobuitrago@gmail.com

**Abstract.** For all industrial sectors, it is important to extend the useful life of the materials they use in their processes, the CaCO<sub>3</sub> scales, are very common in situations where fluids with high ion concentration are handled and in addition high temperatures and concentrations of dissolved CO<sub>2</sub>, this incrustation generates large annual losses due to the reduction in the efficiency of the processes or damage by corrosion under deposit, among others. In order to find new alternatives to this problem, citric acid was evaluated, as a calcium carbonate scale inhibitor at critical temperature conditions and dissolved CO<sub>2</sub> concentrations. Once the results were obtained, the statistical evaluation was carried out in order to generate an equation that allowed to observe said behavior, resulting in good inhibition efficiency at the evaluated conditions, the scale products obtained were characterized by scanning electron microscopy and X-ray diffraction.

**Resumen.** Para todos los sectores industriales, es importante prolongar la vida útil de los materiales que ellos emplean en sus procesos, las incrustaciones de CaCO<sub>3</sub>, son muy comunes en situaciones en donde se manejan fluidos con alta concentración de iones y además de ello altas temperaturas y concentraciones de CO<sub>2</sub> disuelto, dicha incrustación genera grandes pérdidas anuales debido a la reducción en la eficiencia de los procesos o daños por corrosión bajo depósito, entre otros. Con el fin de encontrar nuevas alternativas a este problema, se evaluó el ácido cítrico, como inhibidor de incrustaciones de carbonato de calcio a condiciones críticas de temperatura y concentraciones de CO<sub>2</sub> disuelto. Una vez obtenidos los resultados, se llevó a cabo su evaluación estadística con el fin de generar una ecuación que permitió observar dicho comportamiento, dando como resultado, una buena eficiencia de inhibición a las condiciones evaluadas, los productos de incrustación obtenidos fueron caracterizados, mediante microscopía electrónica de barrido.

## Effect of salt concentration on the formation of fouling deposits on carbon steel from Colombian heavy crude oil

## Efecto de la concentración de sales en el ensuciamiento causado por un crudo pesado colombiano sobre un acero al carbono

D Laverde Cataño<sup>1</sup>, D A Muñoz Pinto<sup>1</sup>, C E Blanco Pinzon<sup>2</sup> and S J García Vergara<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander,

<sup>2</sup> Instituto Colombiano del Petróleo, Ecopetrol, Piedecuesta, Colombia

Email: dlaverde@uis.edu.co

**Abstract.** The effect of total salt content in heavy crude oil on the formation of fouling deposits is investigated in the present work. Fouling in crude oil heat exchangers is costly in terms of energy, maintenance and lost production. The fouling was generated on samples of SA 516 Gr 70 carbon steel by exposure to four Colombian heavy crudes, using a batch stirred tank, operated at 340psi, 15rpm for 35 hours, at 220 y 300°C. To evaluate the deposits on the steel surface, the samples were characterized by gravimetric analysis, Scanning Electron Microscopy (SEM), X-ray diffraction and polarization resistance test. Also, after the test the remaining crude was analyzed. The results show the formation of salt crystals on the samples evaluated at 220°C. However, at 330°C, the samples present a layer of iron sulphide on the surface, suggesting a different fouling mechanism. The findings suggested that the mechanics of fouling is directly affected for both the presence of salt in the crude oil and the temperature.

**Resumen.** En el presente trabajo se estudia el efecto del contenido total de sal de crudos pesados colombianos sobre el fenómeno de ensuciamiento. La formación de depósitos de material no deseado sobre la superficie de los equipos, particularmente los intercambiadores de calor, reduce su eficiencia térmica. Muestras de acero al carbono SA 516 Gr 70, fueron expuestas a cuatro crudos pesados colombianos usando un reactor discontinuo operado a 340psi, 15rpm por 35 horas, a 220 y 300°C. La caracterización de los depósitos formados sobre la superficie del acero, se realizó por gravimetría, microscopía electrónica de barrido (SEM), difracción de rayos X (DRX) y resistencia a la polarización (RP). El crudo remanente fue analizado para observar el cambio en el contenido total de sal. Se observa que el mecanismo de ensuciamiento a una temperatura de 220°C está dado por la cristalización de sales sobre la superficie del acero. Sin embargo, a 300°C se observa la presencia de capas del sulfuro de hierro, sugiriendo que los procesos de corrosión controlan el fenómeno de ensuciamiento a esta temperatura. Los resultados indican que mecanismo de ensuciamiento está determinado tanto por la presencia de sales como por la temperatura.

## Effect of the microstructure of AZ31 magnesium alloy on CaP coatings morphology deposited by means of plasma electrolytic oxidation PEO

## Efecto de la microestructura de la aleación de magnesio AZ31 sobre la morfología de los recubrimientos CaP depositados mediante oxidación electrolítica de plasma PEO

J Molina Rúa<sup>1</sup>, A Zuleta Gil<sup>1</sup>, J D López Carmona<sup>1</sup>, V M Posada Pérez<sup>1</sup>, J F Velásquez Restrepo<sup>1</sup>, F Sánchez Villamil<sup>1</sup> and P Fernández-Morales<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia

Email: [juan.molinar@upb.edu.co](mailto:juan.molinar@upb.edu.co)

**Abstract.** Magnesium alloys are an interesting option to increase the corrosion resistance of magnesium. However, sometimes alloys elements there are not successful in reducing the corrosion process. For this reason, is necessary coatings to protect the material. Plasma electrolytic oxidation (PEO) is a common technique to make anodic coatings on magnesium alloys. This coating depends on substrate factors like chemical composition, distribution and grain size. In this research was analyzed microstructure influence of AZ31 alloy on morphology and chemical composition of anodic coating deposited by means of PEO potentiostat mode. For this work, was used AZ31 alloy two process conditions (as cast and extruded). The samples were anodized in electrolytic bath with NaOH, Ca(OH)<sub>2</sub> and Ca(H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O. The thickness coating approx. to 10.0µm and circle porous with diameter no exceeding 15.0µm. For the extruded samples de porous diameter was approx. 3.0µm near to grain limit. The composition coating was Ca, P, Mg and O.

**Resumen.** Las aleaciones de magnesio son una alternativa interesante para mejorar la resistencia a la corrosión del magnesio. Sin embargo, en algunas ocasiones no es suficiente tener elementos de aleación que retarden el proceso de corrosión, por tal razón es necesario aplicar recubrimientos que le brinden protección al material. La oxidación electrolítica por plasma (PEO) es una de las técnicas empleadas para formar capas anódicas sobre aleaciones de magnesio, las cuales dependen de diferentes factores, entre ellos se encuentran la composición química y, la distribución y tamaño de grano del sustrato. En este trabajo se analizó la influencia de la microestructura de la aleación de magnesio AZ31 sobre la morfología y composición química de un recubrimiento anódico depositado mediante PEO, en condiciones potencioestáticas. Para esto se emplearon muestras de aleación de AZ31 obtenidas bajo diferentes condiciones de proceso (as cast y extrusión), las cuales fueron anodizadas en un baño electrolítico con NaOH, Ca(OH)<sub>2</sub> y Ca(H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O. Se encontró que las películas anódicas formadas tienen un espesor aproximado de 10.0µm y una morfología compuestas por poros circulares no superiores a 15.0µm de diámetro; los cuales, para los sustratos extruidos, son más

pequeños (aprox.  $3.0\mu\text{m}$ ) en la proximidad de los límites de grano. La composición de las capas anódicas fue de Ca, P, Mg y O.

## Effect of zinc thickness on corrosion film breakdown of Colombian galvanized steel

## Efecto del espesor de Zinc en el rompimiento de la capa un acero galvanizado Colombiano

J E Torres Ramírez<sup>1</sup>, P A Cabrales Villamizar<sup>1</sup>, D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>, A A Sandoval Amador<sup>1</sup> and D Laverde Cataño<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: dlaverde@uis.edu.co

**Abstract.** This work presents the corrosion behavior of Colombian galvanized steel in solutions of chloride and sulfates ions. The effect of the thickness and the time of exposure on the film breakdown susceptibility and protectiveness of the corrosion products were studied using, potentiodynamic polarization curves and electrochemical impedance spectroscopy. Corrosion products were analyzed by SEM-EDS and XRD. The samples with the lowest thickness in the zinc film (Z90) shown the lowest corrosion rate, the products of the chemical reactions that occurred, in this particular case, was formed Zinc hydroxide, which exhibits a passive behaviour, as observed in the Pourbaix curves of the potentials obtained and the different ph of the solutions worked. The sheets with the highest thickness presented the best performance, since at the end of the study they presented the least damage on the surface of the zinc layer. This is because the thickness of the zinc layer favors the formation of simonkolleite which is the product of corrosion that protects the material under the conditions of study.

**Resumen.** Este trabajo presenta el comportamiento frente a la corrosión de un acero galvanizado Colombiano en soluciones de iones cloruro y sulfatos. El efecto del espesor y el tiempo de exposición sobre la susceptibilidad a la ruptura de la película y la protección de los productos de corrosión se estudiaron utilizando curvas de polarización potenciodinámica y espectroscopia de impedancia electroquímica. Los productos de corrosión se analizaron mediante SEM-EDS y XRD. En las muestras con menor espesor en la película de zinc (Z90) presentaron la menor velocidad de corrosión, debido principalmente a los productos de las reacciones químicas que se dieron, en este caso en particular se formó hidróxido de Zinc, el cual presenta un comportamiento pasivo, como se observa en las curvas de pourbaix a los potenciales obtenidos y los diferentes ph de las soluciones trabajadas. Las láminas de mayor espesor presentaron el mejor desempeño, ya que al final del estudio presentaron el menor daño en la superficie de la capa de zinc. Esto se debe a que el espesor de la capa favorece la formación de simonkolleita, un producto de corrosión que protege el material bajo las condiciones de estudio.

## Effects of oxidation-nitridation in the presence of water vapor on ASTM A335 P92 steel using SEM-EDS and XPS characterization techniques

## Efectos de la oxidación-nitridación en presencia de vapor de agua sobre el acero ASTM A335 P92 aplicando las técnicas de caracterización SEM-EDS y XPS

J Orozco<sup>1</sup>, D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>, E Franco<sup>1</sup>, L Espinosa<sup>1</sup>, A Alviz Meza<sup>1</sup> and V Kafarov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: [ingjorozcoa@gmail.com](mailto:ingjorozcoa@gmail.com)

**Abstract.** This research studies the physical and chemical changes in steel ASTM A335 P92, produced from a typical refinery corrosion environment. The environment evaluated was oxidation-nitridation with the presence of water vapor. In this study six (6) exposure times were selected: 1, 8, 20, 50, 100 and 200 hours; As well as two (2) analysis temperatures: 450 and 550°C. The working pressure used was one (1) atmosphere, as is done in industrial processes. Metallographic analysis of the ASTM A335 P92 steel specimens was performed before and after each test to identify the possible microstructural change, allowing to verify changes in the steel microstructure. Also, hardness and microhardness analysis were carried out, evidencing a considerable increase in the microhardness of the steel, mainly due to the precipitation of metallic carbides produced by the alloying elements present in this steel. Taking into account the kinetic study, the behavior shown in ASTM A335 P92 steel describes a parabolic growth, characteristic of steels of the same family in corrosion processes at high temperatures. For the tests carried out at 450°C, the kinetic constant was  $2 \times 10^{-8} \text{g}^2 \text{mm}^{-2} \text{h}^{-1}$ , as well as for 550°C the calculated kinetic constant was  $3.1 \times 10^{-7} \text{g}^2 \text{mm}^{-2} \text{h}^{-1}$ ; These results show a good behavior in the ASTM A335 P92 steel, due to the low rates of corrosion, also the direct relationship between the corrosion rate and the temperature in the two kinetic constants shown above. Through the SEM-EDS characterization technique, it was possible to appreciate a good adhesion and homogeneity of the layers formed on the metal matrix until a time of exposure of 100 hours at 450 and 550°C, different from that evidenced to 200 hours of exposure where the layer formed near to the substrate showed detachment, this is attributed to the formation of hydroxides product of water vapor. In addition, by means of this technique, it is possible to observe the elemental increase of chromium and iron in the layers formed at 200 hours in the study temperatures towards the interior of the steel ASTM A335 P92. Also, the analyses of the P92 steel were carried out, making use of the X-Ray Photo-Electronic Spectroscopy characterization technique (XPS). A monochromatic Al K $\alpha$  X-ray source operated at 200W was used for the measurements. The passing energy of the hemispherical analyzer was set at 100eV for the general and 60eV spectra for high resolution spectra. The surface charge compensation was controlled with a Flood Gun operated at 58 $\mu$ A and 2eV. Among the results obtained is the elemental composition, also, the presence of metallic nitrides such as NSi<sub>2</sub>O, NSiO<sub>2</sub> and Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> can be evidenced; oxides of molybdenum: MoO<sub>2</sub> and MoO<sub>3</sub> and iron oxides: FeO and Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

**Resumen.** En este trabajo investigativo se aborda los cambios físicos y químicos en el acero ASTM A335 P92, producidos a partir de un ambiente de corrosión típico de refinería. El ambiente evaluado fue la oxidación-nitridación con la presencia de vapor de agua. En este estudio fueron seleccionados seis (6) tiempos de exposición: 1, 8, 20, 50, 100 y 200 horas; así como dos (2) temperaturas de análisis: 450 y 550°C. La presión de trabajo utilizada fue de una (1) atmósfera, tal como se realiza en los procesos industriales. Se realizaron análisis metalográfico de las probetas de acero ASTM A335 P92 antes y después de cada ensayo para identificar el posible cambio microestructural, permitiendo comprobar cambios en la microestructura del acero. Así mismo, se llevaron a cabo análisis de dureza y microdureza, evidenciando un aumento considerable en la microdureza del acero, debido principalmente a la precipitación de carburos metálicos producto de los elementos aleantes presentes en este acero. Teniendo en cuenta el estudio cinético, el comportamiento mostrado del acero ASTM A335 P92, describe un crecimiento parabólico, característico de aceros de la misma familia en procesos de corrosión a altas temperaturas. Para las pruebas realizadas a 450°C, la constante cinética fue  $2 \times 10^{-8} \text{g}^2 \text{mm}^{-4} \text{h}^{-1}$ , así como para 550°C la constante cinética calculada fue  $3.1 \times 10^{-7} \text{g}^2 \text{mm}^{-4} \text{h}^{-1}$ ; estos resultados evidencian un buen comportamiento en el acero ASTM A335 P92, debido a las bajas velocidades de corrosión, igualmente se aprecia la relación directa entre la velocidad de corrosión y la temperatura en las dos constantes cinéticas mostradas anteriormente. Por medio de los análisis realizados aplicando la técnica de caracterización de microscopía electrónica de barrido de emisión de campo de energía dispersa (SEM-EDS), se pudo apreciar una buena adherencia y homogeneidad de las capas formadas sobre la matriz metálica hasta un tiempo de exposición de 100 horas a 450 y 550°C, distinto a lo evidenciado a 200 horas de exposición donde la capa formada adyacente al sustrato sufrió desprendimiento, esto se atribuye a la formación de hidróxidos producto del vapor de agua. Además, por medio de esta técnica es posible observar el aumento elemental de cromo y hierro en las capas formadas a 200 horas en las temperaturas de estudio hacia el interior del acero P92. Asimismo, fueron llevado a cabo los análisis del acero P92, haciendo uso de la técnica de caracterización espectroscopia foto-electrónica de rayos x (XPS). Para las mediciones se utilizó una fuente de rayos X Al K $\alpha$  monocromatizada operada a 200W. La energía de paso del analizador hemisférico se fijó en 100eV para los espectros generales y 60eV para espectros de alta resolución. La compensación de carga superficial se controló con un Flood Gun operado a 58 $\mu$ A y 2eV. Entre los resultados obtenidos se encuentra la composición elemental, de igual manera, se puede evidenciar la presencia de nitruros metálicos, tales como NSi<sub>2</sub>O, NSiO<sub>2</sub> y Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>; óxidos de molibdeno: MoO<sub>2</sub> y MoO<sub>3</sub> y óxidos de hierro: FeO y Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.



## Electrochemical characterization of corrosion in materials of earthing systems, simulated conditions of synthetic soils with characteristics of local soils

## Caracterización electroquímica de la corrosión en los materiales de sistemas de puesta a tierra, simulando condiciones de suelos sintéticos con características de suelos locales

J C Blanco Rodríguez<sup>1</sup>, Y J Salas Sarmiento<sup>2</sup>, L C Jimenez Borrego<sup>3</sup> and J L Guerrero<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

<sup>2</sup> Universidad INCCA de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>3</sup> Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia

<sup>4</sup> SIGEMEC S.A.S., Tunja, Colombia

Email: jolegue@hotmail.com

**Abstract.** The integrity of structures buried in earthing becomes relevant when analyzing maintenance and replacement costs of these systems, as the deterioration is mainly due to two factors, namely: the failures caused in the electrical systems, which are cleared to the system. Earthing and failure in the electrical performance due to corrosion at the interface, phenomena that cause an alteration in the structure of the component material and return to the system that is useless. Two local soils were chosen that were categorized as francoarenosos and francoarcillosos type, whose chemical characteristics were simulated by means of an electrolyte corresponding to the amount of ions present determined by a soil characterization based on the CICE (effective cation exchange coefficient), which allows us to deduce the percentage of chloride and sulfate ions present for the different levels established in the experimental matrix. The interaction of these soils with grounding electrodes is a complex problem involving many factors to consider. In this study, the rates and corrosion currents of the different soils on two types of electrodes, one copper and the other AISI 304 stainless steel, were approximated by electrochemical techniques such as potentiodynamic curves and electrochemical impedance spectra. Considerably higher speeds were determined for copper-type electrodes when compared to those based on steel. However, from the Nyquist diagrams, it was noted that copper electrodes have better electrical performance than steel ones. The soil with the highest ionic activity turned out to be the Franco-sandy. The free-loam soil presents a tendency to water retention and this may be the reason for the different behavior with respect to ionic mobility. The diffusion control in the steel seems to alter the ionic mobility because its corrosion rates proved to be very similar regardless of the type of soil chemistry. In general, corrosion rates fell by tenths of a millimeter every year to the hundredths of a millimeter in the case of the steel-based electrode, which are relatively small corrosion rates.

**Resumen.** La integridad de estructuras enterradas en puestas a tierra cobra relevancia cuando se analizan costos de mantenimiento y sustitución de estos sistemas, pues el deterioro se debe

principalmente a dos factores, a saber: las fallas ocasionadas en los sistemas eléctricos, que son despejadas al sistema de puesta a tierra y la falla en el desempeño eléctrico debido a corrosión en la interfase, fenómenos que producen una alteración en la estructura del material componente y vuelven al sistema inservible. Se escogieron dos suelos locales que fueron categorizados como tipo francoarenosos y francoarcillosos cuyas características químicas fueron simuladas mediante un electrolito con correspondencia a la cantidad de iones presentes determinadas por una caracterización de suelos basada en el CICE (Coeficiente de Intercambio Cationico Efectivo), lo cual nos permito deducir los porcentajes de iones cloruro y sulfato presentes para los diferentes niveles establecidos en la matriz experimental. La interacción de estos suelos con los electrodos de puesta a tierra es un problema complejo que involucra muchos factores a considerar. En este estudio se realizó una aproximación a las velocidades y corrientes de corrosión características de los distintos suelos sobre dos tipos de electrodos, uno cobre y el otro acero inoxidable AISI 304, mediante técnicas electroquímicas como las curvas potenciodinámicas y espectros de impedancia electroquímica. Se determinó unas velocidades considerablemente mayores para electrodos tipo cobre si se comparaban con los que se basan en acero. Sin embargo, a partir de los diagramas de Nyquist, se notó que los electrodos de cobre presentan mejor desempeño eléctrico que los de acero. El suelo que presentaba mayor actividad iónica resulto ser el francoarenoso. El control por difusión en el acero parece que altera la movilidad iónica pues sus velocidades de corrosión resultaron ser muy semejantes sin importar el tipo de química del suelo. En general, las velocidades de corrosión cayeron en las décimas de milímetro cada año hasta las centésimas de milímetro en el caso del electrodo basado en acero, que son velocidades de corrosión relativamente pequeñas.

## Electrochemical techniques implementation for corrosion rate measurement in function of humidity level in grounding systems (copper and stainless steel) in soil samples from Tunja (Colombia)

### Aplicación de técnicas electroquímicas para la medición de la velocidad de corrosión en función del nivel de humedad en sistemas de puesta a tierra (cobre y acero inoxidable) en muestras de suelo de Tunja (Colombia)

Y J Salas Sarmiento<sup>1</sup>, J L Guerrero<sup>2</sup>, J C Blanco Rodríguez<sup>3</sup> and S P Vera Monroy<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Universidad INCCA de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>2</sup> SIGEMEC S.A.S., Tunja, Colombia

<sup>3</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

<sup>4</sup> Universidad Manuela Beltrán, Bogotá, Colombia

Email: yecid.salas@unincca.edu.co

**Abstract.** In this work, DC electrochemical techniques were used to determine the corrosion rate of copper and stainless steel electrodes used in grounding, varying the level of humidity, in sandy loam and clay loam soils. The maximum corrosion potentials were: for copper -211 and -236mV and for stainless steel of -252 and -281mV, in sandy loam and clay loam respectively, showing that in sandy loam the values are higher, about 30mV. The mechanism by which steel controls corrosion is by diffusion, whereas in copper it is carried out by transfer of mass and charge, which affects the rate of corrosion, which in copper reached a maximum value of 5mm/yr and in steel 0.8mm/yr, determined by Tafel approximations. The behavior of the corrosion rate was mathematically adjusted to an asymptotic model that faithfully explains the C.R. as a function of humidity, however, it is necessary to define the relation between the factor  $\square$  established in the model and the precise characteristics of the soil, such as the permeability or quantity of ions present.

**Resumen.** En este trabajo se utilizaron técnicas electroquímicas DC para determinar la velocidad de corrosión de electrodos de cobre y acero inoxidable, usados en puestas a tierra, variando el nivel de humedad, en suelos franco arenoso y franco arcilloso. Los potenciales de corrosión máximos fueron: para el cobre -211 y -236mV y para el acero inoxidable de -252 y -281mV, en suelos franco arenoso y franco arcilloso respectivamente, demostrando que en el suelo franco arenoso los valores son más altos, alrededor de 30mV. El mecanismo mediante el cual el acero controla la corrosión es por difusión, mientras que en el cobre se realiza por transferencia de masa y carga, lo que afecta la velocidad de corrosión, que en cobre alcanzó un valor máximo de 5mm/yr y en acero 0,8mm/yr, determinados por aproximaciones Tafel. El comportamiento de la velocidad de corrosión fue ajustado matemáticamente a un modelo asintótico que explica fielmente el fenómeno de cambio de C.R. en función de la humedad, sin

embargo, falta definir la relación entre el factor  $\square$  establecido en el modelo y las características precisas del suelo, como la permeabilidad o la cantidad de iones presentes.

## Evaluation of corrosion products formed by sulphidation as inhibitors of the naphthenic corrosion of AISI-316 steel

## Evaluación de productos de corrosión formados por sulfuración como inhibidores de la corrosión nafténica del acero AISI-316

N D Montañez Supelano<sup>1</sup>, D Laverde Cataño<sup>1</sup>, C A Mejia Miranda<sup>1</sup>, J A Sanabria Cala<sup>1</sup>  
and D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: nerlym85@gmail.com

**Abstract.** Naphthenic acids present in oil from most regions worldwide currently stand as the main culprit of the naphthenic corrosion problems affecting the oil-refining industry. The phenomenon of sulphidation, accompanying corrosion processes brought about by naphthenic acids in high-temperature refining plant applications, takes place when the combination of sulphuric acid (H<sub>2</sub>S) with iron (Fe) forms layers of iron sulphur (FeS) on the surface of the material, layers with the potential to protect the material from attack by other corrosive species like naphthenic acids. This work assessed corrosion products formed by sulphidation as inhibitors of naphthenic corrosion velocity in AISI 316 steel exposed to processing conditions of simulated crude oil in a dynamic autoclave. Calculation of the sulphidation and naphthenic corrosion rates were determined by the application of gravimetry. The surfaces of the AISI-316 gravimetric coupons exposed to acid systems were characterized morphologically by characterization techniques as X-ray Diffraction (XRD) and X-ray Fluorescence by Dispersive Energy (EDS) combined with Scanning Electron Microscopy (SEM). One of the results obtained was the determination of an inhibiting effect of corrosion products at 250 and 300°C, where lower corrosion rate levels were detected. For the temperature of 350°C, naphthenic corrosion rates increased as result of deposition of naphthenic acids on the areas where corrosion products formed by sulphidation have lower homogeneity and stability on the surface, thus accelerating the destruction of 316 AISI steel. The above provides a contribution to the oil industry in the search for new alternatives to corrosion control by the attack of naphthenic acids, from the formation of FeS layers on exposed materials in the processing of heavy crude oils with high sulphur content.

**Resumen.** Los ácidos nafténicos presentes en la mayoría de crudos de las regiones de todo el mundo, son los principales culpables de los problemas de corrosión nafténica que afectan a la industria de la refinación del petróleo. El fenómeno de sulfuración, que acompaña a los procesos de corrosión provocados por los ácidos nafténicos en la refinación de crudos pesados a alta temperatura, tiene lugar cuando la combinación del ácido sulfhídrico (H<sub>2</sub>S) con hierro (Fe) forman capas de sulfuro de hierro (FeS) sobre la superficie del material expuesto, estas películas pueden tener un potencial anticorrosivo al proteger el material contra el ataque de otras especies corrosivas como los ácidos nafténicos. En este trabajo, se evaluó la capacidad anticorrosiva de los productos de corrosión formados por sulfuración como inhibidores de la velocidad de

corrosión nafténica del acero AISI 316 expuesto a condiciones de procesamiento de un crudo simulado. El cálculo de la velocidad de corrosión por sulfuración y nafténica se determinó mediante la aplicación de gravimetría. La superficie de los cupones gravimétricos AISI-316 expuestos a los sistemas ácidos se caracterizaron morfológicamente por medio de técnicas de caracterización como: Difracción de rayos X (DRX) y Fluorescencia de Rayos X por Energía Dispersiva (EDS) en combinación con Microscopía Electrónica de Barrido (SEM). De los resultados obtenidos se determinó un efecto inhibitor de los productos de corrosión formados por sulfuración sobre el material expuesto a unas temperaturas entre 250 y 300°C en el sistema nafténico, a estas condiciones la velocidad de corrosión tuvo un comportamiento decreciente en el material. Para la temperatura de 350°C, las velocidades de corrosión nafténicas del material aumentaron como resultado de la deposición de los ácidos nafténicos en las áreas donde los productos de corrosión formados por sulfuración tienen menor homogeneidad y estabilidad en la superficie, acelerando así la destrucción del acero AISI-316 en el sistema. Lo anterior provee una contribución a la industria petrolera en la búsqueda de nuevas alternativas hacia el control de la corrosión por el ataque de ácidos nafténicos, a partir de la formación de capas de FeS en materiales expuestos en el procesamiento de crudos pesados con altos contenidos de azufre.

## Isothermal oxidation in the presence of water vapor in ASTM A335 P92 steel using SEM-EDS and XPS

## Oxidación isotérmica en presencia de vapor de agua en el acero ASTM A335 P92 usando SEM-EDS y XPS

J Orozco<sup>1</sup>, A Alviz Meza<sup>1</sup>, D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup> and V Kafarov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: [ingjorozcoa@gmail.com](mailto:ingjorozcoa@gmail.com)

**Abstract.** The research focuses on the study of oxidation in the presence of water vapor on steel ASTM A335 P92. The corrosive atmosphere of interest used was 9.46%O<sub>2</sub>-90.54H<sub>2</sub>O (% mol). This atmosphere of study was chosen taking into account historical data of gas chromatography reported at the Barrancabermeja Refinery on the two products of interest as were oxygen gas and water vapor. The research work was carried out on a laboratory scale, selecting five (5) service times: 1, 20, 50, 100 and 200 hours; as well as two working temperatures: 450 and 550°C. All experiments were performed at one (1) atmosphere pressure. For the entrance of the water vapor, it became necessary to design and construct device, which would allow the process of humidification of the oxygen gas before the admission of the humidified mixture to the tubular furnace where the ASTM A335 P92 steel specimens were. Hardness and microhardness analyzes were performed, before and after exposure of the test specimens to the corrosive environment, in order to evaluate the observed changes; in addition to performing the metallographic tests to identify the variations in the structure once exposed the test pieces to the evaluated corrosive mixture. The kinetic behavior described in the experiments carried out at 450 and 550°C represents a clearly parabolic tendency, which normally occurs in corrosive compounds that show a protective behavior, due to the initially considerable gain or loss of mass, but while after the exposure period this variation in the mass of the exposed material usually becomes smaller. The graphs were obtained through the study of discontinuous gravimetry, using a precise balance with a degree of accuracy of 4 decimals. Within the results obtained from the X-ray Photoelectron Spectroscopy characterization technique (XPS), the elemental surface composition of the corrosive elements and compounds present is revealed. These corrosive compounds were determined by means of the binding energy of the spectra of the elements present, it was also possible to determine the energetic environment of these products. On the other hand, considering the analyzes carried out using (SEM-EDS) can be seen for the tests carried out at 450°C and 100 hours of exhibit a good adhesion and homogeneity of the two (2) layers formed, evidencing a good performance of ASTM A335 P92 steel to work done to these conditions; Likewise, for the tests carried out at 550°C and 200 hours, the formation of two (2) layers of oxides, with an excellent homogeneity between them, as well as with the metallic substrate is shown. In addition, the x-ray Dispersion Spectroscopy (EDS) analyzes show the collective profile of the elements on the layers formed in the 550°C and 200hour exposure tests; It is possible to appreciate the increase in the atomic composition of iron, chromium and oxygen.

**Resumen.** La investigación se centra en el estudio de la oxidación en presencia de vapor de agua sobre el acero ASTM A335 P92. La atmosfera corrosiva de interés utilizada fue 9.46%O<sub>2</sub>–90.54H<sub>2</sub>O (% molar). Esta atmosfera de estudio fue elegida teniendo en cuenta datos históricos de cromatografía de gases reportados en la Refinería de Barrancabermeja sobre los dos productos de interés como lo fueron el gas oxígeno y vapor de agua. El trabajo investigativo fue realizado a escala de laboratorio seleccionando cinco (5) tiempos de servicio: 1, 20, 50, 100 y 200 horas; así como dos temperaturas de trabajo: 450 y 550°C. Todos los experimentos fueron realizados a una (1) atmosfera de presión. Para el ingreso del vapor de agua, se hizo necesario diseñar y construir un burbujeador, el cual permitiera el proceso de humidificación del gas oxígeno antes del ingreso de la mezcla humidificada al horno tubular donde se encontraban las probetas de acero ASTM A335 P92. Fueron efectuados análisis de dureza y microdureza, antes y después de la exposición de las probetas al ambiente corrosivo, con el fin de evaluar los cambios observados; además de realizar los exámenes metalográficos para identificar las variaciones en la estructura una vez expuestas las probetas a la mezcla corrosiva evaluada. El comportamiento cinético descrito en las experimentaciones realizadas a 450 y 550°C, representa una tendencia claramente parabólica, la cual normalmente se presenta en compuestos corrosivos que muestran un comportamiento protector, debido a que inicialmente se presenta una ganancia o pérdida de masa considerable, pero mientras transcurre el periodo de exposición esta variación en la masa del material expuesto suele convertirse más pequeña. Las gráficas fueron obtenidas a través del estudio de gravimetría discontinua, utilizando una balanza precisa con un grado de exactitud de 4 decimales. Dentro de los resultados encontrados a partir de la técnica de caracterización espectroscopia foto-electrónica de rayos x (XPS), se revela la composición elemental superficial de los elementos y compuestos corrosivos presentes. Estos compuestos corrosivos, fueron determinados por medio de la energía de enlace de los espectros de los elementos presentes, también se hizo posible determinar el entorno energético de estos productos. Por otra parte, teniendo en cuenta los análisis realizados a través de la técnica de caracterización de microscopía electrónica de barrido de emisión de campo de energía dispersa (SEM-EDS), se puede apreciar para las pruebas realizadas a 450°C y 100 horas de exposición una buena adherencia y homogeneidad de las dos (2) capas formadas, evidenciando un buen comportamiento del acero ASTM A335 P92 a trabajos realizados a dichas condiciones; de igual manera, para los ensayos realizados a 550°C y 200 horas, se muestra la formación de dos (2) capas de óxidos, con una excelente homogeneidad entre ellas, así como con el sustrato metálico. Además, mediante de los análisis de espectroscopia de dispersión de rayos x (EDS), se muestra al perfil colectivo de los elementos sobre las capas formadas en los ensayos de 550°C y 200 horas de exposición; es posible apreciar el aumento en la composición atómica del hierro, cromo y oxígeno.



## Methodology for evaluation of corrosion damage obtained during combustion process in a boiler. Case study: Ferritic steel ASTM A335 P91

## Metodología para la evaluación del daño corrosivo obtenido durante el proceso de combustión de una caldera. Caso de estudio: Acero ASTM A335 P91

A Alviz Meza<sup>1</sup>, D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup> and V Kafarov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: anibalalvizm@hotmail.com

**Abstract.** Prevention of the corrosion damage is key point to assure process safety in a boiler. Controlling and stopping corrosion is only possible through the detailed evaluation of all processes related with the corrosion damage. In this work was proposed a methodology to evaluate the corrosion damage obtained during combustion process in an industrial boiler. As a study case, the evaluation of ferritic steel ASTM A335 P91 (P91) was realized in an atmosphere generated during the combustion process. The corrosion products formed were simulated at 450°C in the software HSC Chemistry. As a model mixture for the simulation it was used the historical chromatographic records from the energy source used in an industrial boiler. These results were compared with experimental results, in which corrosion coupons of P91 steel were installed inside a boiler at 450°C. The corrosion rate was calculated by gravimetric analysis, and the morphology and composition of the corrosion products were obtained by Scanning Electron Microscopy with X-Ray Microanalysis (SEM-EDS); showing similarity between the corrosion products thrown in the simulation. The gravimetric analysis showed that the corrosion rate of P91 steel had a parabolic behavior; it was explained because the formation of an internal oxide layer rich in chromium. It was confirmed through SEM analysis, where a compact oxide internal layer without cracks or voids was evidenced. On the other hand, SEM-EDS analysis showed that the corrosion products formed on P91 steel corresponded mainly to iron oxides and spinels. Finally, it is important to mention that the methodology applied in this work is applicable to other steels in industrial corrosive environments as in boilers and furnaces.

**Resumen.** La prevención del daño por corrosión es clave para asegurar la seguridad del proceso de combustión en una caldera. Controlar y detener la corrosión sólo es posible a través de la evaluación detallada de todos los procesos relacionados con el daño por corrosión. En este trabajo se propuso la metodología para evaluar el daño por corrosión obtenido durante el proceso de combustión en una caldera industrial. Como caso de estudio se realizó la evaluación del acero ASTM A335 P91 (P91) en una atmósfera generada durante el proceso de combustión. Los productos de corrosión formados fueron simulados a 450°C en el software HSC Chemistry. Como mezcla modelo de gases utilizada para la simulación, se tomaron los registros cromatográficos históricos de la fuente de energía de una caldera industrial. Estos resultados se

compararon con los resultados experimentales, en los que se instalaron cupones de corrosión del acero P91 dentro de una caldera a 450°C. La cinética de corrosión fue calculada por gravimetría discontinua, mientras que la morfología y composición de los productos de corrosión fueron obtenidos a través de SEM-EDS; mostrando similitud entre los productos de corrosión arrojados en la simulación. El análisis gravimétrico mostró que la velocidad de corrosión del acero P91 tuvo un comportamiento parabólico; lo que se explica por la formación de una capa interna de óxido rica en cromo. Esto fue confirmado mediante el análisis de SEM; donde se revelo una capa interna de óxido compacta, sin grietas ni vacíos. Por otra parte, el análisis SEM-EDS mostró que los productos de corrosión formados sobre acero P91 correspondieron principalmente a óxidos de hierro y espinelas. Finalmente, es importante mencionar que la metodología aplicada en este trabajo es aplicable a otros aceros en entornos corrosivos industriales, como en calderas y hornos.

## Resistance to erosive wear of alumina coatings

## Resistencia al desgaste erosivo de recubrimientos de alúmina

Z Y Ramírez Jaimes<sup>1</sup>, E Hernández<sup>2</sup>, C G Cárdenas Arias<sup>1</sup> and A Santos<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Unidades Tecnológicas de Santander, Bucaramanga, Colombia

<sup>2</sup> Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

Email: zulma.ramirez1@hotmail.com

**Abstract.** This project aims to determine the behavior of alumina coatings, obtained from micrometric size particles deposited through a thermal spraying by flame process, when are subjected to erosive wear caused by cavitation through a vibratory apparatus. The methodology used to achieve the proposed objective consisted of four phases; in the first one, the UIP1000hd ultrasound equipment was adapted to the requirements of ASTM G32-16 (Standard test method for erosion by cavitation using vibrating apparatus); subsequently, AISI 304 stainless steel specimens were tested to verify the methodology and equipment used, the validation of the wear phenomenon in the specimens was carried out through scanning electron microscopy tests in order to observe the evolution of the trace left on the specimen; as a third step the deposition of the alumina coatings was carried out through a conventional oxyacetylene combustion equipment and an Eutalloy 85 BX gun; Finally, specimens of steel coated with alumina were tested and graphs that define the behavior of this material to the phenomenon of erosive wear were obtained. The results obtained allowed to validate the methodology and the equipment used in the tests since que average error rate between experimental and theoretical data was 8.5% for AISI 304 stainless steel; regarding the behavior of the alumina coatings, a second-order polynomial tendency of erosive wear resistance was obtained with regard to the time of the test performance.

**Resumen.** Este proyecto tiene como objetivo determinar el comportamiento de recubrimientos de alúmina, obtenidos a partir de partículas de tamaño micrométrico depositadas a través de un proceso de rociado térmico por llama, cuando están sometidos a desgaste erosivo originado por cavitación a través de un aparato vibratorio. La metodología utilizada para alcanzar el objetivo propuesto consistió de cuatro fases, en la primera se realizó una adaptación del equipo de ultrasonido UIP1000hd a los requerimientos exigidos por la norma ASTM G32-16 (Método de pruebas estándar para erosión por cavitación usando aparatos vibratorios); posteriormente se ensayaron probetas de acero inoxidable AISI 304 para comprobar la metodología y el equipo utilizado, la validación del fenómeno de desgaste presente en las probetas se realizó a través de ensayos de microscopía electrónica de barrido con el fin de observar la evolución de la huella dejada sobre el espécimen; como tercera fase se realizó la deposición de los recubrimientos de alúmina a través de un equipo de combustión oxiacetilénica convencional y una pistola Eutalloy 85 BX; por último se ensayaron probetas de acero recubiertas con alúmina y se obtuvieron las gráficas que definen el comportamiento de este material ante el fenómeno de desgaste erosivo. Los resultados obtenidos permitieron validar la metodología y el equipo utilizado en los ensayos ya que el porcentaje de error promedio entre los datos experimentales y teóricos fue del 8.5% para el acero inoxidable AISI 304; respecto al comportamiento de los recubrimientos de alúmina

se obtuvo una tendencia polinomial de segundo orden de la resistencia al desgaste erosivo con respecto al tiempo de realización del ensayo.

## Study of oxidation and nitridation environments in typical corrosion atmospheres from a refinery furnace at high temperatures: Case study, ferritic steel ASTM A335 P91

## Estudio de ambientes de oxidación y nitrificación en atmósferas de corrosión típicas de un horno de refinería a altas temperaturas: Caso de estudio, acero ferrítico ASTM A335 P91

A Alviz Meza<sup>1</sup>, D Y Peña Ballesteros<sup>1</sup> and V Kafarov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

Email: anibalalvizm@hotmail.com

**Abstract.** Starting from a problem related to the energy management of the different gas streams from the Colombian refinery, to arise the needing in to study the corrosive effects that occur during the combustion process in a furnace at high temperatures. In this case, oxidation and nitridation phenomena were evaluated on ASTM A335 P91 steel in O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O and O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O environments, based on a model refinery mixture and the molar ratios of its theoretical combustion products. Taking into account the composition of the steel and environments, it was carried out the simulation of the theoretical corrosion products through the chemical software HSC Chemistry. By contrasting the results of the simulation with the results obtained by XRD and SEM-EDS, congruence was obtained. Five (5) exposure times were selected for the experimental development: 1, 10, 20, 50 and 100 hours; As well as two (2) analysis temperatures: 450 and 550°C. In what corresponds to the evaluation of the physical results of the steel coupons used in the different experiments, it was found that through the metallographic analysis, it is possible to evidence the presence of multiple carbide precipitates and a ferritic structure in both temperatures evaluated. On the other hand, the tests of hardness and micro-hardness indicated an increase and decrease respectively. The increase in hardness was due to the heat shock that occurred when the coupons were removed from the furnace, and the decrease in the micro-hardness was due to the different oxide layer formed on the surface of the alloy. Regarding to the chemical analysis, it was possible to conclude that after 100 hours of experimentation in each atmosphere, a layer of duplex oxide, composed mainly of hematite, magnetite and spinel iron-chromium was formed. Finally, the kinetic study demonstrated that the oxide layer formed on the P91 steel was protective, because it showed an apparent parabolic behavior. This was corroborated by SEM-EDS analysis, in which the presence of a compact oxide layer was evidenced in the region adjacent to the substrate surface.

**Resumen.** Partiendo de una problemática relacionada con la gestión energética de las redes de gases combustibles de la refinería colombiana, surge la necesidad de estudiar los efectos corrosivos que se desarrollan durante el proceso de combustión en un horno a altas temperaturas. En este caso, se evaluaron los fenómenos de oxidación y nitrificación sobre el acero ASTM A335 P91, en ambientes de O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O y O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O, partiendo de una mezcla modelo de refinería y las

relaciones molares de sus productos teóricos de combustión. Teniendo en cuenta la composición del acero y los ambientes a evaluar se realizó la simulación de los productos teóricos de corrosión a través del software termodinámico HSC Chemistry. Al contrastar los resultados de la simulación con los resultados obtenidos por DRX y SEM-EDS se obtuvo congruencia. Para el desarrollo experimental se seleccionaron cinco (5) tiempos de exposición: 1, 10, 20, 50 y 100 horas; así como dos (2) temperaturas de análisis: 450 y 550°C. En lo que corresponde a la evaluación de los resultados físicos de los cupones de acero utilizados en los diferentes experimentos, se encontró que a través de las metalográficas es posible evidenciar la presencia de múltiples precipitados de carburos y una estructura ferrítica. Por otro lado, las pruebas de dureza y micro-dureza indicaron un aumento y una disminución respectivamente. El aumento en la dureza se debió al choque térmico al que se ven expuestos los cupones al extraerlos del horno, y la disminución en la microdureza fue debido a las capas de óxido formadas en la superficie del material. En cuanto a los análisis químicos, es posible concluir que después de 100 horas de experimentación en cada atmósfera, se formó una capa de óxido dúplex, compuesta de hematita, magnetita y espinela hierro-cromo principalmente. Finalmente, el estudio cinético mostró que la capa de óxido formada sobre el acero P91 era de carácter protector, ya que presentó un comportamiento claramente parabólico. Lo que se corroboró por medio del análisis de SEM-EDS, en el cual se evidenció la presencia de una capa protectora de espinela hierro-cromo en la región adyacente a la superficie del sustrato.

## Use of vegetable extract as corrosion coating on steel rebars in a saline environment

## Uso de un extracto vegetal como recubrimiento anti-corrosión de acero de refuerzo en ambiente salino

Y Garcia<sup>1</sup> and E Quiñones<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

Email: ygarciad1@unicartagena.edu.co

**Abstract.** The present work was focused on determining the inhibition capacity of the *C. Odorata* L. gum exudate as steel rebar covering against the corrosion originate by the saline environmental conditions presented in the city of Cartagena de Indias. Five tests were performed: Mass loss (ASTM G1-90) in atmospheric exposure, copper-copper sulfate half-cell test (ASTM C 876–91), atmospheric salinity, rebound hammer test and thermic characterization with DSC for the plant exudate. The corrosion rates varied between 0.0127 and 0.0237mgcm<sup>-2</sup>h<sup>-1</sup>, being greater in the blank samples and lower in the steel covered with the extract. The chloride deposition rate was 5.35gm<sup>-2</sup>yr<sup>-1</sup>, the salinity was 10.08gm<sup>-2</sup>yr<sup>-1</sup>, the moisture had a value of 83.93% and the wind speed 14.05kmh<sup>-1</sup> that means the environmental exposition is aggressive which is consistent with international information. The half-cell test showed potential differences between -0.573 and -0.368V having a better performance the samples in which was applied 2% exudate. In general, all the samples have a tendency to be more positives, nevertheless, the blank samples were showing a slower corrosion rate, which suggests a greater probability of active corrosion. As the exudate concentration increases the steel mass loss decreases. The inhibition efficiency was in a range 25.1% and 46.4% obtaining better results for the samples with 33.33% concentration. In view of the above, it's concluded that the saline environment presented in Cartagena is strong due to the high rate of chloride deposition and the climatic parameters. However, in this environment, the *C. Odorata* L. gum exudate has a great potential as a corrosion inhibitor on reinforcement steel.

**Resumen.** El presente trabajo tuvo como objetivo determinar la capacidad inhibidora del exudado gomoso de *C. Odorata* L. (Cedro) en acero de refuerzo expuesto a la corrosión del ambiente salino de la ciudad de Cartagena de Indias. Los procedimientos aplicados fueron un ensayo de intemperismo (ASTM G1-90), ensayo de media celda electroquímica Cu/CuSO<sub>4</sub> (ASTM C 876 – 91), prueba de salinidad atmosférica, prueba con esclerómetro y caracterización térmica con DSC para el exudado vegetal. Las velocidades de corrosión variaron entre 0.0127 y 0.0237mgcm<sup>-2</sup>h<sup>-1</sup>, siendo mayor la velocidad calculada para las muestras blanco y menores en las muestras revestidas con inhibidor. La tasa de deposición de cloruros fue de 5.35gm<sup>-2</sup>año<sup>-1</sup>, la salinidad fue 10.08gm<sup>-2</sup>año<sup>-1</sup>, la humedad tuvo un valor de 83,93% y la velocidad del viento 14,05kmh<sup>-1</sup> lo que indica que el ambiente de exposición es agresivo según datos internacionales. La prueba de celda electroquímica reveló diferencias de potencial entre -0.573 y -0.368V teniendo un mejor comportamiento los especímenes en donde se usó un recubrimiento

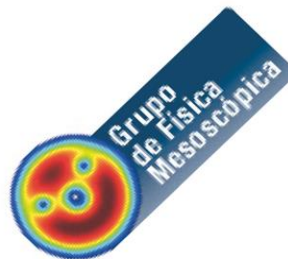
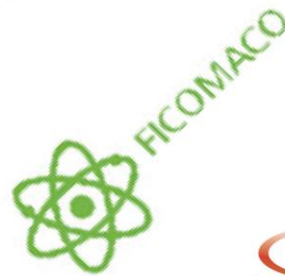
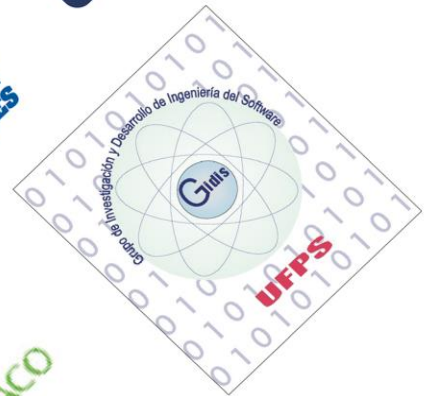
con 2% de exudado; en general todas las muestras tienden a hacerse más positivas, sin embargo, las muestras blanco evidencian una dinámica mucho más lenta, indicando mayor probabilidad de corrosión activa. Hay una relación inversa entre la pérdida de peso del acero y la concentración de exudado. Las eficiencias de inhibición registradas estuvieron entre 25.1% y 46.4% siendo las muestras con concentración de 33.33% de exudado las de mayor inhibición. Lo anterior nos lleva a concluir que la corrosión del acero de refuerzo en el ambiente salino de la ciudad de Cartagena es alta debido a la alta deposición de cloruros y los parámetros climáticos, sin embargo, bajo este ambiente el exudado gomoso de *C. Odorata* L. tiene un gran potencial como inhibidor de la corrosión del acero de refuerzo.





**Foristom**  
 Foundation  
 of Researches in Science  
 and Technology of Materials

Sponsor



Partners