

Abstracts Book

INTERNATIONAL MEETING FOR RESEARCHERS IN

MATERIALS & PLASMA TECHNOLOGY - IMRMPT

7TH
IMRMPT



Foristom
Foundation

JUNE 7 - 9, 2023

CARTAGENA DE INDIAS, COLOMBIA

Ely Dannier V. Niño
Chairman 7th IMRMPT

Ely Dannier V. Niño
Editor, Layout Coordinator

Erick Yovardo Parra Cañas
Cover Design, Web Design, Web Programming

Abstract Book Address Information

Ely Dannier V. Niño
Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials (FORISTOM)
Bucaramanga, Santander, Colombia
E-mail: info@foristom.org

Copyright © 2023 FORISTOM – FUNDACIÓN OF RESEARCHERS IN SCIENCE AND TECHNOLOGY OF MATERIALS. Abstracts Book of the Seventh International Meeting for Researchers in Materials & Plasma Technology (7th IMRMPT); academic and scientific event sponsored by the FORISTOM Foundation. **ISSN 2422-3824**. This is a publication of the FORISTOM Foundation; the responsibility for the information published lies with the speakers themselves.

Directives Fundación of Researchers in Science and Technology of Materials

Ely Dannier V. Niño
Chief Executive Officer

José José Barba Ortega
Financial and administrative Director

Alejandro David Martínez Amariz
Academic and scientific Director

Organizing Committee

Ely Dannier V. Niño (Chairman)

Erica Mejía Restrepo (Co-chairman)
Gabriel Peña Rodríguez (Co-chairman)

Miryam Rincón Joya
Mariana Pereyra Pérez
José José Barba Ortega
José Luis Endrino Armenteros
Alejandro David Martínez Amariz

National Scientific Committee

- Dra. Miryam Rincón Joya
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.
- Dr. José José Barba Ortega
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.
- Dr. Jairo Roa Rojas
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.
- Dr. Erica Mejía Restrepo
Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín
- Dr. Hugo Armando Estupiñan Durán
Universidad Nacional de Colombia, Medellín
- Dr. Héctor Jaime Dulce Moreno
Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta
- Dr. Gabriel Peña Rodríguez
Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta
- Dr. Alejandro David Martínez Amariz
Universidad de Santander, Bucaramanga
- Dr. Harold Paredes Gutiérrez
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. David Alejandro Miranda Mercado
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Enrique Mejía Ospino
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Yesid Peña Ballesteros
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Octavio Andrés González Estrada
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Rogelio Ospina Ospina
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dr. Rafael Cabanzo Hernández
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Dra. Claudia Paulina González Cuervo
Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga
- Dr. Ely Dannier V. Niño
Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Bucaramanga
- Dr. (c) Anderson Sandoval Amador
Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Bucaramanga
- MSc. Hernán Alfonso Garnica Villamizar
Corporación para la Investigación de la Corrosión, Piedecuesta

International Scientific Committee

- Dr. José Luis Endrino Armenteros
Universidad Loyola, Spain
- Dr. Raquel González Arrabal
Universidad Politécnica de Madrid, Spain
- Dr. Antonio Juan Rivera de Mena
Universidad Politécnica de Madrid, Spain
- Dr. Ovidio Yordanis Peña Rodríguez
Universidad Politécnica de Madrid, Spain
- Dr. Juan Manuel Muñoz Guijosa
Universidad Politécnica de Madrid, Spain
- Dr. Enrique Chacon Tanarro
Universidad Politécnica de Madrid, Spain
- Dr. Andrés Díaz Lantada
Universidad Politécnica de Madrid, Spain
- Dr. Iván Fernández Martínez
Nano4Energy, Spain
- Dr. Juan Muñoz Saldaña
Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Mexico
- Dr. Jhon Edisson Torres Ramírez
Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina
- Dr. Mariana Pereyra Perez
Universidad de la República, Uruguay
- Dr. Eduardo Daniel Méndez Morales
Universidad de la República, Uruguay
- Dr. Claudinei de Souza Guimaraes
Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brazil
- Dr. Aníbal Alviz Meza
Universidad Señor de Sipán, Perú
- Dr. Linda Elcida Gil Lozada
Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Venezuela
- MSc. Luisa Fernanda Ortiz Vásquez
Universidad Loyola, Spain

Invited Speakers

- ✓ Dr. Guillermo Fernández Zapico
UTriboBlend, Japan
- ✓ Dr. Jaime Caro Prados
Fundación EURECAT, Spain
- ✓ Dr. Steven Tidrow
Alfred University, United States of America
- ✓ Dr. Juan Muñoz Saldaña
Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Mexico
- ✓ Dr. Jhon Edisson Torres Ramírez
Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina
- ✓ Dr. Mariana Pereyra Perez
Universidad de la República, Uruguay
- ✓ Dr. Elaine Cristina Paris
Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, Brazil

Topics



INTERNATIONAL MEETING FOR RESEARCHERS IN

MATERIALS
& PLASMA
TECHNOLOGY - IMRMPT

- ✓ **New Materials**
- ✓ **Structural Integrity**
- ✓ **Renewable Energy**
- ✓ **Biomedical Coatings**
- ✓ **Additive Manufacturing**
- ✓ **Online Process Control**
- ✓ **Non Destructive Evaluation**
- ✓ **Characterization of Materials**
- ✓ **Thin Films and Nanomaterials**
- ✓ **Wear and Corrosion/Oxidation**
- ✓ **Plasma Applications and Technologies**
- ✓ **Modeling, Simulation, and Diagnostics**
- ✓ **Education in Materials Science, Engineering,
and Technology**
- ✓ **Science, Engineering, Technology, and Innovation
for Social Inclusion**
- ✓ **Surface Modification (Ion Implantation, Ion Nitriding,
Magnetron Sputtering, Cathodic Arc, Sol-Gel, Thermal Spray)**

Contents

Invited Keynote Speaker	1
Next generation materials for electronic applications.....	2
Bactericidal surface treatments for dental implants based on silver and copper ion co-implantation	3
Electric-field dipole engineering at the nanoscale	5
Emerging bismuth-based photocatalysts and their thermal spray processing for heterojunction coupling in a top-down approach	6
Characterization of materials to develop corrosion sensors to building industry	8
Transparency in insects: a study of the physicochemical, optical, and morphological factors.....	10
Nanostructures and nanocomposites of polymeric matrix for waste reuse and environmental remediation....	11
Additive Manufacturing (AM).....	13
Analysis of the mechanical and thermal properties of a polymeric matrix of tripropylene glycol diacrylate reinforced with pineapple fibers.....	14
Design and fabrication methodology for canine transmetatarsal prostheses by additive manufacturing	15
Fatigue behavior prediction of additive manufacturing composites reinforced with long fibers using machine learning	17
Long-short-term memory networks to predict mechanical behavior of additive manufacturing composites reinforced with carbon fiber	18
Sample holder for X-ray diffraction: Bruker D8 Advance Eco diffractometer.....	19
Characterization of Materials (CM).....	20
Affectation in fatigue resistance in stainless steels with welded joints.....	21
A first principles study of the CO ₂ capture by small copper clusters.....	23
Analysis of static and fatigue properties of bio-based epoxy composites reinforced with woven fique, jute, and flax fibers.....	24
Characterization of a pumice stone geopolymer and its selectivity in the removal of ionic contaminants	25
Characterization of industrial waste of titanium foundry grade 5 for application in parts of the automotive industry.....	26
Characterization of nickel cobaltite nanoparticles obtained by sol-gel technique: optical and structural study	27
Characterization of structural and electronic properties of zinc oxide with cerium impurities	28
Characterization of the nopal as a plant species cultivated in Boyacá, Colombia as a potential corrosion inhibitor	29
Characterizations of Pb(Zr _{0.52} Ti _{0.48})O ₃ /CoFe ₂ O ₄ multiferroic particulates composites in 80/20 and 50/50 molar proportional by microwave-assisted method	30

Chitosan-activated carbons: an option for the manufacture of low-cost supercapacitor electrodes	32
Consequences of adding small copper clusters on the 001 surfaces of anatase	33
Current effect on the critical parameters from paraconductivity analysis for the high-temperature superconductor $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$	34
Development of a measurement system to quantify electrical resistivity in solid materials	35
Dosimetric characteristics of the main thermoluminescent glow peak of aquamarine	36
Effect of argon plasma treatment on the properties of biocomposites made with rattan and bamboo fibers ...	37
Elaboration and characterization of bioplastics from mixtures of starch obtained from avocado seeds and silver nanoparticles	38
Evaluation of the electrical and magnetic properties of the $Bi_{1-x}Yb_xFeO_3$	39
Evaluation of the structural, morphological, and optical properties of the CuO/WO_3 system	40
Kinetic analysis of the glow curve of $\alpha-Al_2O_3$	41
Mesoporous nanostructures $PrCoO_3$ doped Sr ($0.1 < x < 0.5$) nanostructures: synthesis, and structural and optical characterization	42
Observation of granular Josephson mechanism and the vortex-glass transition in the polycrystalline superconductor $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$	43
Optical sensor based on lamellar double hydroxide for the detection of the polyphenol acid chlorogenic acid in coffee waste	44
Potential of dodecylamine-functionalized graphene oxide as a carbon dioxide capture material	46
Preliminary study using Raman spectroscopy for identified microplastics ingested by zooplankton in Colombia caribbean region	48
Synthetic hydroxyapatite coatings doped with copper ions	49
Use of mining tailings sludge as a percentage substitute for cement in the design of concrete mixture for the pilot construction of footprint plate in the municipality of Vetás, Santander, Colombia	51
Determination of the structural behavior of fiber-reinforced microconcrete plates for load-bearing wall systems	53
Modeling, Simulation and Diagnostics (MSD)	54
Computational fluid dynamics modelling and sensitivity study of the vapor absorption in a bubble double pipe absorber	55
Characterization of mechanical properties of porcine bone using finite element models and experimental tests	57
Comparative axial compression testing of porcine vertebrae by laboratory testing and finite element analysis	58
Critical temperature and hysteresis loops of an ising-type ferromagnetic system of spins 1 and 2: a Monte Carlo study	59
Effects of exchange and anisotropy interactions on the compensation and hysteresis behaviors of a ferrimagnet of (7/2 and 2)-spins	60

First-principles calculations of the structural and electronic properties of GaAs/InAs interfaces..... 61

Influence of surface defects on the vortex penetration and arrangement at mesoscopic superconducting samples 62

Molecular dynamics study of oil/water separation by graphene oxide and alkylamine-modified graphene oxide membranes..... 63

Mutual information for prediction of relevant parameters in the perovskite solar cell synthesis 64

Pattern analysis in meteorological and biotic variables for modeling pest risks in avocado crops using machine and deep learning 66

Pattern recognition of two-phase flow in vertical pipes using artificial intelligence techniques..... 67

Simulation of robots' swarm aggregation using the Beeclust method..... 68

Simulation of the electronic and structural properties of GaM_xAs_{1-x} doped with bi, p, sb atoms for possible applications in solar cells 69

Statistical techniques based on variants of the geometric mean filter applied to 3D preprocessing of computed tomography medical images..... 70

Substitution of traditional materials with organic reinforcement composites..... 71

Thermal distribution during friction stir welding of polymers using the finite elements method..... 73

Thermo-pillars as anti-pinning centers in a superconducting cube..... 74

Transfer matrix method in multilayer applications: a simulation 75

Type-I superconductivity: spike vortex state 76

New Materials (NM)..... 77

Ab-initio study of the capture of lead using the T-MnO₂/graphene interface..... 78

Adsorption of mercury species on the T-MnO₂ monolayer: a first-principles study 80

A study of the electronic properties of the g-ZnO/graphene interface with and without impurities derived from chrome, manganese, and copper..... 81

Biodegradability of cassava starch-based biofilms exposed in simulated soil..... 82

Biodegradable polymer of cassava starch (*manihot esculenta*) and cardol extracted from cashew nutshell oil..... 84

Capture of arsenic on graphene-like hexagonal zinc oxide monolayer surfaces with and without graphene substrate..... 86

Capture of cadmium using the T-MnO₂/graphene interface 87

Characterization of structural properties and of the surface on the electronics of titanium dioxides with cerium impurity 88

Cyclic use of a pumice-based geopolymer for the removal of cadmium present in industrial effluents 89

Dioxides transition metal monolayers: ab initio study..... 91

Effect of minor addition of marble dust on the compressive strength of concrete composites 92

Effect of the Fe ³⁺ ion substitution in the b-site on electric and magnetic properties of the novel perovskite Sr _{0.33} Sm _{0.67} Ti _{0.33} Mn _{0.67} O ₃ ceramics.....	94
Effects of the substitution of transition metal atoms on the electronic properties of g-ZnO monolayer	95
Electronic and magnetic properties of w-BN doped with vanadium	96
Energetics in the growth of a graphene-like hexagonal zinc oxide monolayer on graphene substrate.....	97
Evaluation of the effect of a thermosetting coating of polyurethane resin and graphene oxide on physicochemical and mechanical properties of cementitious matrices.....	98
Experimental determination of the effective thermal conductivity with direct temperature measurement technique for BPGK	100
Influence of the synthesis pathway upon the thermoluminescent response of gadolinium aluminate matrix phosphors	101
Low cost geopolymers prepared from pumice stone and the influence of the alkaline activator in the sorption of methylene blue	102
Magnetic microspheres obtained from raw iron rolling scale.....	104
Optimization of the biochar generation process from coconut endocarp (<i>cocus nucifera</i>) as a potential source for the synthesis of graphene materials.....	106
Optimization of the synthetic method for obtaining geopolymers.....	108
Research of physico-mechanical properties of natural fabrics coated on thermosetting compounds of graphene oxide and polyurethane resin for reinforcement of textile reinforced concrete composites.....	110
Rice husk as a sustainable source for the synthesis of graphene oxide.....	112
Structural, compositional, morphological, optical, and magnetic response of the CaLaTiFeO ₆ double perovskite	114
Structural, compositional, morphologic, and magnetic features of the RCa ₂ SbFe ₂ O ₉ triple perovskite.....	116
Study of dodecylamine functionalized graphene oxide as a molecular surfactant in water/oil systems.....	118
Study of the bidimensional heterostructure of graphene/g-AlN in the framework of density functional theory.....	120
Two-dimensional allotropic structures of III-V binary compounds. Calculation of first principles.....	121
Plasma Applications and Technologies (PAT).....	122
High temperature infiltration behavior and reaction characteristics of Colima volcanic ashes on gadolinium zirconate coatings deposited by atmospheric plasma spraying.....	123
Metal hydride films produced by hydrogen transport in a hollow cathode	124
Renewable Energy (RE).....	125
Application of different Reynolds-averaged Navier–Stokes k- ω models in the solution of turbulent flow problems	126
Economic and energy analysis of the use of municipal solid waste for energy generation at the Universidad Industrial de Santander, Colombia	127

Experimental thermal fatigue analysis of 316L stainless steel for application in high temperature concentrated solar power plants 129

Hydrogen production through the electrolysis process of production waters from La Cira Infantas oil field, Colombia 130

Modeling, simulation, and analysis of the mechanical behavior of the blade of a vertical axis wind turbine in the Chicamocha canyon in Santander, Colombia 131

Physical-chemical and microbial parameters relationship of domestic waste water treated by UASB reactor in biogas generation process 132

Flat thermosyphon welded by epoxy resin for thermal control of photovoltaic panels 133

Structural Integrity (SI)..... 134

Evaluation of equivalent stress intensity factor models under mixed mode fracture in low carbon steel 135

Evaluation of nopal on corrosion phenomena in structural steels by electrochemical evaluations 136

Influence of nopal (*opuntia ficus-indica*) on hydration phenomena and setting times of Colombian commercial cement 137

Surface Modification (Ion Implantation, Ion Nitriding, Magnetron Sputtering, Cathodic Arc, Sol-Gel, Thermal Spray) (SM)..... 138

Microstructure and mechanical properties of oxynitrided Ti₆Al₄V water collected in-flight particles from twin wire arc spraying 139

Plasma-assisted nitriding of M2 steel by the AEGD technique and characterization of base and nitrided material for different times of the nitriding process..... 140

Study of the advances and applications of conventional flame spray in the last decade 141

Thin Films and Nanomaterials (TFN)..... 143

Composite magnetic skyrmion systems in asymmetric bilayers..... 144

Effect of graphene oxide magnetic nanofluids on improved oil recovery 145

Effect of organic thin films morphology and light-emitting layer thickness on the opto-electric properties in an organic light emitting diode 147

Ni and Zn-doped YBCO nanowires produced by the Solution Blow Spinning technique 148

Obtaining layers of titanium oxide on the surface of a titanium substrate..... 149

Production of iron oxide-based nanoheterostructures for applications in magnetic hyperthermia therapy.... 150

Simulation of the absorber layer thickness variation in SnS solar cells using Matlab..... 151

Synthesis and characterization of magnetic graphene oxide: nanomaterial with potential applications to reduce the viscosity of heavy oil 152

Vortex state in a two-band mesoscopic superconductor/ferromagnetic hybrid system 154

Biomedical Coatings (BC) 155

Production and characterization of rhenium-carbon based coatings deposited by sputtering technique..... 156

Wear and Corrosion/Oxidation (WCO)	157
Characterization of thermal films formed between 100 °C to 400°C on ASTM A-213 T91 (Fe ₉ Cr ₁ Mo) steel in atmospheres: H ₂ S-N ₂ -O ₂ and air	158
Chemical species formed on the surface of borided AISI 316L under wet sliding wear.....	159
Comparative analysis of thermal films formed between 100 °C to 400 °C on ASTM A-213 T92 steel (Fe ₉ Cr _{0.5} Mo) in atmospheres: H ₂ S-N ₂ -O ₂ and air.....	160
Improvement of the physicochemical properties of a Colombian heavy crude under thermal recovery conditions with oil-soluble catalysts and their effect on the corrosion of API P110 steel.....	161
Online Process Control (OPC)	162
Application of liquid polystyrene products as a viscosity reducer for heavy Colombian crude oils.....	163
Education in Materials Science, Engineering and Technology (EMSET)	164
Applied research at the Institución Universitaria Pascual Bravo, Colombia	165
Characterization of energy fluctuations in an electronic system connected to a Maxwell’s demon implemented with CMOS inverter pairs	167
Crack growth analysis using the dual boundary element method, an application in Matlab.....	168
Didactics and curricular innovation in the faculty of engineering	170
Science, Engineering, Technology, and Innovation for Social Inclusion (SETISI)	171
Bibliometric study of the application of industry 4.0 in process control through Scopus and Web of Science databases (2013-2022).....	172
Bibliometric study on the impact of industry 4.0 on business management in the decade (2013-2022).....	173
Develop of a cooling system using solar energy for the artisanal fishing industry	174
Experimental evaluation of cutting forces for tire recycling tools.....	175
Hybrid kinematic simulation of human gait pattern for different velocities.....	176
Numerical analysis of sharpening profiles for tire recycling cutting tools	178
Strengthening of the productive chain of sachá inchi in the ancestral Kite Kiwe community: analysis of planting and transformation into derived products	179
Water desalination plants an emergency alternative in educational institutions of La Guajira, Colombia	180

Invited Keynote Speaker

Conferencista Magistral Invitado

Next generation materials for electronic applications

Siguiente generación de materiales para aplicaciones en electrónica

G Fernández Zapico¹

¹ Triboblend, Madrid, Spain

E-mail: guillermo.fernandez.zapico@gmail.com

Abstract. Recently, the quantity of data generated has increased exponentially creating the necessity of more efficiency and fast data treatment. The Moore law indicates that the number of transistors on the chip is duplicated every two years, which allows faster computing performance (current transistor are as small as 2nm). However, in the last years, it seems that the Moore law is “dying”, creating the necessity of investigating new alternatives which allow better and faster performance without decreasing the transistor size. Among this alternatives, we can find advanced materials.

Resumen. Recientemente, la cantidad de datos generados se ha incrementado exponencialmente y con ello la necesidad de tratarlos de forma más eficiente, rápida y sostenible. La ley de Moore indica que el número de transistores en un chip se duplica cada dos años, permitiendo velocidades de cálculo mucho más elevadas y rápidas (actualmente nos encontramos en transistores de 2nm). Sin embargo, en los últimos años parece que la ley de Moore esta “muriéndose”, creando necesidad de alternativas a la reducción del tamaño de los transistores para seguir cumpliendo con las necesidades del mercado. Entre estas alternativas se encuentra el uso de materiales avanzados.

Bactericidal surface treatments for dental implants based on silver and copper ion co-implantation

Tratamientos superficiales bactericidas para implantes dentales basados en la co-implantación iónica de plata y cobre

J Caro Prados¹, R Bonet Montserrat¹, J Orrit-Prat¹, and J Muñoz Villanueva²

¹ Fundació Eurecat, Barcelona, Spain

² Microdent Implant System, Barcelona, Spain

E-mail: joan@microdentsystem.com

Abstract. In the field of dental implantology, the widespread use of dental implants has been one of the most important changes and advances in dental practice in recent years. However, in spite of the predictability of dental implant treatments, which show success rates of around 90% after 10 years of insertion, there are still important problems to overcome, with a group of pathologies that cause the loss of peri-implant bone and, finally, the loss of the implant. In particular, infection caused by bacterial colonization (peri-implantitis) is one of the main causes of implant failure. Among the different approaches proposed to solve this problem, the surface treatment of implants by incorporating bactericidal metal ions (Cu, Ag, Zn) has been studied. Silver is by far the most effective biocidal metal element, acting on a broad spectrum of bacteria (both gram-negative and gram-positive), showing a low tendency to develop bacterial resistance, and inhibiting polymicrobial colonization. Its bactericidal efficacy has been demonstrated against pathogens commonly found in peri-implantitis: *S. mutans*, *S. aureus*, *S. oralis*, *P. gingivalis* and *A. actinomycetemcomitans*. Moreover, since ancient times, copper ion has been recognized as a potent bactericidal agent against a wide range of bacteria, fungi, and viruses. On the basis of the foregoing, in this work, bactericidal surface treatments on titanium grade 4 have been developed by means of silver and copper ion co-implantation using a metal vapor vacuum arc ion source. Morphology, structure, and silver/copper concentration depth profile were characterized by scanning electron microscopy and X-ray photoelectron spectroscopy as a function of ion implantation voltage and dose. Mechanical properties were analyzed by means of nanoindentation. Cytotoxicity was studied using mammal fibroblasts BALB/3T3. The antibacterial activity against *S. aureus* and *E. coli*, and the resistance to the formation of a biofilm composed of the bacteria *F. nucleatum*, *P. gingivalis* and *A. actinomycetemcomitans* was analyzed.

Resumen. En el campo de la implantología dental, el uso generalizado de implantes dentales ha supuesto uno de los cambios y avances más importantes en la práctica odontológica de los últimos años. Sin embargo, a pesar de la predictibilidad de los tratamientos con implantes dentales, que presentan tasas de éxito en torno al 90% a los 10 años de su colocación, todavía existen importantes problemas que superar, con un conjunto de patologías que provocan la pérdida de hueso periimplantario y, finalmente, la pérdida del implante. En particular, la infección causada por la colonización bacteriana (peri-implantitis) es una de las principales causas de fracaso de los implantes. Entre los distintos enfoques propuestos para resolver este problema, se ha estudiado el tratamiento superficial de los implantes mediante la incorporación de iones metálicos bactericidas (Cu, Ag, Zn). La plata es, con diferencia, el elemento metálico biocida más eficaz, ya que actúa sobre un amplio espectro de bacterias (tanto gramnegativas como grampositivas), muestra una baja tendencia a desarrollar resistencia bacteriana e inhibe la colonización polimicrobiana. Se ha demostrado su eficacia bactericida frente a patógenos comúnmente encontrados en la peri-implantitis: *S. mutans*, *S. aureus*, *S. oralis*, *P. gingivalis* y *A. actinomycetemcomitans*. Además, desde la antigüedad, el cobre ha sido reconocido como un potente agente bactericida contra una amplia gama de bacterias, hongos y virus. En base a lo anterior, en este trabajo se han desarrollado tratamientos superficiales bactericidas sobre titanio grado 4 mediante co-implantación de iones de plata y cobre utilizando una fuente de iones metal vapor

vacuum arc. La morfología, estructura y perfil de profundidad de concentración de plata/cobre se caracterizaron mediante microscopía electrónica de barrido y espectroscopía de fotoelectrones de rayos X en función del voltaje y dosis de implantación iónica. Las propiedades mecánicas se analizaron mediante nanoindentación. La citotoxicidad se estudió utilizando fibroblastos de mamífero BALB/3T3. Se analizó la actividad antibacteriana frente a *S. aureus* y *E. coli*, y la resistencia a la formación de un biofilm compuesto por las bacterias *F. nucleatum*, *P. gingivalis* y *A. actinomycetemcomitans*.

Electric-field dipole engineering at the nanoscale

Ingeniería de dipolos de campo eléctrico a nanoescala

S Tidrow¹

¹ Alfred University, Alfred, United States of America

E-mail: tidrow@alfred.edu

Abstract. Efficient energy conversion and high energy density storage materials that support high power rates and trillions of cycles, made of environmentally friendly materials, are needed to overcome environmental sustainability issues. The construct of electric-field dipole engineering at the nanoscale affords special opportunity for material science and engineering not contemplated within semiconductor physics. The electric-field dipole engineering at the nanoscale provides the opportunity for scientific investigation of local through macroscale electric- fields and an engineering opportunity to systematically control essential intrinsic material properties: resistivity, breakdown field strength, relative permittivity and loss tangent that control the efficiency of energy conversion, length of time and amount of energy density that can be stored. Semiconductor physics can be modified to understand the results of electric-field dipole engineering at the nanoscale, local reverse biased p-n junction effects at the nanoscale that increase resistivity and breakdown field strength, which control the length of time dielectric energy can be stored and the maximum energy that can be stored for a given relative permittivity material. The relative permittivity can be designed using the Mossotti–Lorenz–Lorentz–Clausius relation. The resistivity and electric-field breakdown strength of the material can be designed using appropriate dipole pairs. Data are presented that demonstrate the unique potential of electric-field dipole engineering at the nanoscale as both a scientific and engineering tool. Currently, at low concentration of substituents (<2 at%), resistivity has been shown to increase resistivity by up to ten-million times, breakdown field strength by more than an order of magnitude, and diffuseness of relative permittivity controlled from ferroelectric to diffuse phase transition to relaxor-like properties; yet the materials are not strict relaxors.

Resumen. Se necesitan materiales de conversión de energía eficiente y almacenamiento de alta densidad de energía que admitan altas tasas de potencia y billones de ciclos, hechos de materiales ecológicos, para superar los problemas de sostenibilidad ambiental. La construcción de ingeniería de dipolo de campo eléctrico a nanoescala brinda una oportunidad especial para la ciencia e ingeniería de materiales que no se contemplan dentro de la física de semiconductores. La ingeniería de dipolo de campo eléctrico a nanoescala brinda la oportunidad de realizar investigaciones científicas de campos eléctricos locales a macroescala y una oportunidad de ingeniería para controlar sistemáticamente las propiedades intrínsecas esenciales de los materiales: resistividad, fuerza de campo de ruptura, permitividad relativa y tangente de pérdida que controlan la eficiencia de la conversión de energía, la duración del tiempo. y la cantidad de densidad de energía que se puede almacenar. La física de los semiconductores se puede modificar para comprender los resultados de ingeniería de dipolo de campo eléctrico a nanoescala, efectos locales de unión p-n con polarización inversa a nanoescala que aumentan la resistividad y la intensidad del campo de ruptura, que controlan el tiempo que se puede almacenar la energía dieléctrica y la energía máxima que se puede almacenar para un material de permitividad relativa dado. La permitividad relativa se puede diseñar utilizando la relación Mossotti–Lorenz–Lorentz–Clausius. La resistividad y la resistencia a la ruptura del campo eléctrico del material se pueden diseñar utilizando pares de dipolos apropiados. Se presentan datos que demuestran el potencial único de ingeniería de dipolo de campo eléctrico a nanoescala como herramienta tanto científica como de ingeniería. Actualmente, a una baja concentración de sustituyentes (<2 at%), se ha demostrado que la resistividad aumenta la resistividad hasta diez millones veces, la intensidad del campo de ruptura en más de un orden de magnitud y la difusividad de la permitividad relativa controlada de transición de fase ferroeléctrica a difusa a propiedades relajantes; sin embargo, los materiales no son relajantes estrictos.

Emerging bismuth-based photocatalysts and their thermal spray processing for heterojunction coupling in a top-down approach

Fotocatalizadores emergentes a base de bismuto y su procesamiento por rociado térmico para el acoplamiento de heterouniones en un enfoque descendente

J Muñoz-Saldaña¹, A I Gutiérrez Pérez¹, I D Rosales Andrade¹, M T Ayala Ayala¹, J S Pérez Bedolla¹, and A M Benítez Castro¹

¹ Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Querétaro, México

E-mail: angelica.benitez@cinvestav.mx

Abstract. Photocatalysis has become important in the development of sustainable technologies for environmental remediation and energy conversion. The design of a photocatalyst that can efficiently utilize visible light without the drawback of increased recombination is a critical challenge. Bismuth-based compounds have recently been recognized as the basis for multifunctional ceramics with applications in environmental remediation, alternative clean piezoelectric power, smart materials, and biomedicine. Particularly, visible light photoactive $(\text{Na}_x\text{K}_{1-x})_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$ (NKBT) heterojunctions have demonstrated their applicability in environmental remediation. In this work, piezoelectric powders of bismuth-based perovskite $(\text{Na}_x\text{K}_{1-x})_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$ (NKBT100x), where $x = 1, 0.8$ and 0.6 , were synthesized by ball milling and solid-state reaction. The results of physical, chemical, and photocatalytic properties of nitro blue tetrazolium (NBT) and NKBT 60 based powders/coatings are reported. In experiments spraying powders in a mixture of NKBT 60 and bismuth metal powders in a 50/50 vol:vol ratio and, collected in a staged powder reactor, their structural, microstructural, and optical characteristics were obtained, as well as their effect on the photocatalytic activity in two model reactions: photodegradation of rhodamine B (irradiation and photooxidation of methanol in formaldehyde, both under sunlight). According to the structural and chemical analysis, flame spraying is an advantageous method that allows growing NBKT-bismuth titanates-titanium oxides (anatase and/or rutile)-bet- Bi_2O_3 -Bi heterojunctions from NBKT/Bi mixtures in a top-down approach. Variations in phase content in the heterojunction can be adjusted by collecting the powders at different stages of the powder reactor. Further characterizations showed that the obtained powders exhibit raspberry-like morphology and nanostructured active surfaces as well as reduced visible light forbidden band energies. The multiphase heterojunction powder of beta- Bi_2O_3 -NKBT40- $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ - $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ -anatase-Bi presented the highest photocatalytic performance. The reaction rate constant, k_{RhB} and k_{MetOH} were calculated to be $33.45 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$ and $0.25 \times 10^{-6} \text{ min}^{-1}$, respectively, making this material more photoactive than those used commercially and suitable for these reactions. NBT microspheres were also deposited by oxyacetylene flame spraying. The physicochemical properties were analyzed as a function of the spray parameters: fuel/oxygen ratio, standoff distance and total gas flow. A flame with reducing characteristics promotes the formation of TiO_2 (anatase and rutile) and $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$, while an oxidizing flame results in coatings rich in NBT and $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$. The standoff distance mainly influences the degree of crystallinity, which is higher at shorter distances. Optical properties estimated by UV-VIS diffuse reflectance confirmed an increase in light absorption after the FS process, with an E_g redshift from 3.32 eV of the NBT powder to 2.63 eV-2.96 eV of the coatings. These values are fuel/oxygen ratio dependent, with a significant narrowing of E_g under reducing conditions. Photoelectrochemical measurements revealed that faster electron uptake is obtained due to the transformations occurring throughout the FS process, while retaining almost 70% and 88% of the photocurrent density at UV and visible light, respectively. These results suggest the great potential of the FS methodology to produce multiphase photocatalytic coatings by tuning the processing parameters.

Resumen. La fotocatalisis ha cobrado importancia en el desarrollo de tecnologías sostenibles para la recuperación del medio ambiente y la conversión de energía. El diseño de un fotocatalizador que pueda utilizar eficazmente la luz visible sin el inconveniente de una mayor recombinación es un reto crítico. Recientemente se ha reconocido que los compuestos basados en el bismuto son la base de cerámicas multifuncionales con aplicaciones en la remediación medioambiental, la energía piezoeléctrica limpia alternativa, los materiales inteligentes y la biomedicina. En particular, las heterouniones fotoactivas a la luz visible ($(\text{Na}_x\text{K}_{1-x})_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$ (NKBT) han demostrado su aplicabilidad en la remediación medioambiental. En este trabajo, se sintetizaron polvos piezoeléctricos de perovskita basada en bismuto ($(\text{Na}_x\text{K}_{1-x})_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$ (NKBT100x), donde $x=1, 0,8$ y $0,6$, mediante molienda con bolas y reacción en estado sólido. Se reportan los resultados de las propiedades físicas, químicas y fotocatalíticas de los polvos/recubrimientos basados en nitroazul de tetrazolio (NBT) y NKBT 60. En experimentos rociados con una mezcla de polvos de NKBT 60 y polvos metálicos de bismuto en una proporción 50/50 vol:vol y, recogidos en un reactor de polvos por etapas, se obtuvieron sus características estructurales, microestructurales y ópticas, así como su efecto sobre la actividad fotocatalítica en dos reacciones modelo: fotodegradación de rodamina B (irradiación y fotooxidación de metanol en formaldehído, ambas bajo luz solar). Según el análisis estructural y químico, el rociado con llama es un método ventajoso que permite cultivar heterouniones NBKT-titanatos de bismuto-óxidos de titanio (anatasa y/o rutilo)-beta- Bi_2O_3 -Bi a partir de mezclas NBKT/Bi en un enfoque descendente. Las variaciones en el contenido de fase en la heterounión pueden ajustarse recogiendo los polvos en diferentes etapas del reactor de polvo. Otras caracterizaciones mostraron que los polvos obtenidos presentan una morfología similar a la de la frambuesa y superficies activas nanoestructuradas, así como energías de banda prohibida de luz visible reducidas. El polvo heterounión multifase de beta- Bi_2O_3 -NKBT40- $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ - $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ -anatasa-Bi presentó el mayor rendimiento fotocatalítico. La constante de velocidad de reacción, k_{RhB} y k_{MetOH} se calcularon en $33,45 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$ y $0,25 \times 10^{-6} \text{ min}^{-1}$, respectivamente, lo que hace que este material sea más fotoactivo que los utilizados comercialmente y adecuado para estas reacciones. También se depositaron microesferas de NBT mediante rociado con llama oxiacetilénica. Se analizaron las propiedades fisicoquímicas en función de los parámetros del rociado: relación combustible/oxígeno, distancia de separación y flujo total de gas. Una llama con características reductoras promueve la formación de TiO_2 (anatasa y rutilo) y $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$, mientras que una llama oxidante da lugar a recubrimientos ricos en NBT y $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$. La distancia de separación influye principalmente en el grado de cristalinidad, que es mayor a distancias más cortas. Las propiedades ópticas estimadas por reflectancia difusa UV-VIS confirmaron un aumento de la absorción de luz tras el proceso de FS, con un desplazamiento al rojo de E_g de 3,32 eV del polvo de NBT a 2,63 eV-2,96 eV de los recubrimientos. Estos valores son dependientes de la relación combustible/oxígeno, con un estrechamiento significativo de E_g en condiciones reductoras. Las medidas fotoelectroquímicas revelaron que se obtiene una captación de electrones más rápida debido a las transformaciones que tienen lugar a lo largo del proceso de FS, conservando casi el 70% y el 88% de la densidad de fotocorriente a luz UV y visible, respectivamente. Estos resultados sugieren el gran potencial de la metodología FS para producir recubrimientos fotocatalíticos multifásicos mediante el ajuste de los parámetros de procesamiento.

Characterization of materials to develop corrosion sensors to building industry

Caracterización de materiales para el desarrollo de sensores de corrosión en la industria de la construcción

J E Torres Ramírez¹

¹ Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, Argentina

E-mail: jtorram@gmail.com

Abstract. This research work is a first step in the development of a simple, versatile, and economical sensor to be embedded in reinforced concrete structures to determine the corrosion rate of reinforcing steel. The feasibility of using galvanic couple current monitoring as a method to sense and assess the level of rebar corrosion was investigated. To this purpose, the electrochemical behavior of four candidate metals to build the sensor (SAE 1040 carbon steel, copper, AISI 304 stainless steel and titanium) embedded in mortar and exposed to different environmental conditions was characterized. Three proposed galvanic couples (carbon steel/stainless steel, carbon steel/copper and carbon steel/titanium), as well as carbon steel bars (of the same type of those used as reinforcements) were embedded in mortar specimens. The objective was to find out a correlation between the current of the galvanic couples and the real corrosion rate of the rebars in a broad range of environmental conditions. It was found that copper and titanium showed good resistance to localized corrosion, being excellent candidates to be used in highly corrosive environments, particularly in the presence of chlorides. However, from the electrochemical characterization, it became evident that the metal generating the greatest galvanic currents when coupled with the carbon steel was copper. Furthermore, the measurement of the galvanic current showed the importance of the anodic/cathodic area ratio relationship. It was found that when the anode/cathode area ratio was 1:7, a correlation between the galvanic current of the carbon steel/copper couple and the corrosion current of the carbon steel could be established. As a conclusion, among the three galvanic couples proposed, the carbon steel/copper one seems to be the most promising one to build a sensor.

Resumen. Este trabajo de investigación es el primer paso en el desarrollo de un sensor simple, versátil y económico para ser embebido en estructuras de hormigón armado para determinar la velocidad de corrosión del acero de refuerzo, y está basado en el principio de par galvánico. Con este fin, en primera instancia se caracterizó el comportamiento electroquímico de cuatro metales candidatos a formar parte del sensor (acero al carbono SAE 1040, cobre, acero inoxidable AISI 304 y titanio), embebidos en mortero y expuestos a diferentes condiciones ambientales. Posteriormente se estudió la viabilidad del monitoreo de la corriente galvánica como método para establecer y detectar el nivel de corrosión de las barras de refuerzo. A tal efecto, se fabricaron probetas de mortero con los tres pares galvánicos propuestos (acero al carbono/acero inoxidable, acero al carbono/cobre y acero al carbono/titanio) embebidos en ellas, así como también probetas de mortero con barras de acero al carbono (del mismo tipo de material usado como refuerzo). El objetivo fue establecer si existe una correlación entre la corriente de los pares y la velocidad de corrosión de las barras de refuerzo en una amplia gama de condiciones ambientales. En la caracterización electroquímica se hizo evidente que el metal que genera mayores corrientes galvánicas al ser acoplado con acero al carbono fue el cobre. Además, se encontró que el cobre y el titanio presentaron buena resistencia a la corrosión localizada, siendo excelentes candidatos para ser usados en ambientes altamente agresivos, en especial por la presencia de cloruros. Por otro lado, la medición de la corriente galvánica mostró la importancia de la relación de área ánodo/cátodo. Se encontró que cuando esta relación es de 1:7, se puede establecer una relación entre la corriente galvánica del par de acero al carbono/cobre y la corriente de corrosión del acero

al carbono. Entre los tres pares galvánicos propuestos, el par acero al carbono/cobre es el más promisorio para construir un sensor del tipo propuesto.

Transparency in insects: a study of the physicochemical, optical, and morphological factors

Transparencia en insectos: estudio de factores fisicoquímicos, ópticos y morfológicos

M Pereyra¹, G Bentancur-Viglione¹, J P Martinez¹, P Fagúndez¹, P Valente¹, J Pereyra¹, E Morelli¹, R Marotti¹, and E Dalchiele¹

¹ Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

E-mail: dalchiel@fing.edu.uy

Abstract. Nanostructures are natural features that occur in animals and plants at the nanometer scale and influence their functions. For example, nanostructures are responsible for the hydrophobicity of plant leaves and the structural color of butterfly and bird feathers, which have inspired many technological applications. However, nanostructures are also found in insects that have transparent surfaces, such as some butterfly wings. The role of nanostructures in transparency is controversial, it is unclear whether these nanostructures are essential for transparency or whether they depend on the chemical composition of the wing components. In this study, we investigate the nanostructures in the transparent wings of *Episcada hymenaea*, a native butterfly species that lacks scales on most of its wings. Using materials characterization techniques, we analyse the structural, optical, and chemical properties of the transparent region and identify the factors that contribute to transparency. We also compare our results with those of *Heliconisa pagenstecheri*, night moth specie with transparent wings. Our findings clarify the role of nanostructures in transparency and provides insights for biomimetic applications.

Resumen. Las nanoestructuras son características naturales que ocurren en animales y plantas a escala nanométrica e influyen en sus funciones. Por ejemplo, las nanoestructuras son responsables de la hidrofobicidad de las hojas de las plantas y del color estructural de las plumas de mariposas y pájaros, que han inspirado muchas aplicaciones tecnológicas. Sin embargo, las nanoestructuras también se encuentran en insectos que tienen superficies transparentes, como algunas alas de mariposa. El papel de las nanoestructuras en la transparencia es controvertido, no está claro si estas nanoestructuras son esenciales para la transparencia o si dependen de la composición química de los componentes del ala. En este estudio, investigamos las nanoestructuras en las alas transparentes de *Episcada hymenaea*, una especie de mariposa nativa que carece de escamas en la mayoría de sus alas. Usando técnicas de caracterización de materiales, analizamos las propiedades estructurales, ópticas y químicas de la región transparente e identificamos los factores que contribuyen a la transparencia. También comparamos nuestros resultados con los de *Heliconisa pagenstecheri*, especie de polilla nocturna con alas transparentes. Nuestros hallazgos aclaran el papel de las nanoestructuras en la transparencia y brindan información para aplicaciones biomiméticas.

Nanostructures and nanocomposites of polymeric matrix for waste reuse and environmental remediation

Nanoestructuras y nanocompuestos de matriz polimérica para la reutilización de residuos y la recuperación medioambiental

E C Paris¹

¹ Embrapa Instrumentação, São Carlos, Brazil

E-mail: elaine.paris@embrapa.br

Abstract. Nanomaterials have been applied in various areas of society. There is a growing demand for developing systems with superior performance and lower costs. Materials obtained from the recovery of mineral and agricultural waste have been gaining more space due to the environmental impact minimization and the obtaining of second-generation products. In both cases, it is possible to perform reuse, separation and obtaining new compounds with active properties from an appropriate chemical treatment associated with different processing. In turn, synthetic nanomaterials obtained by commercial sources require precursor sources that allow structural and morphological control, and reproducibility, resulting in a wide range of research to obtain more efficient technologies and reduced cost. Recoverable and reusable nanomaterials for water and air decontaminating by adsorptive and photocatalytic processes, which have a high surface area, are promising for environmental remediation. Furthermore, nanostructures can be inserted into polymeric systems, allowing their use as nanocomposite films and fibers with unique properties that favor easy recovery in application processes and their use in antimicrobial and ultraviolet-visible protection membranes, mechanical reinforcement, and in the release of agro-industrial nutrients. Nanoparticles can be used to deliver mineral nutrients to the soil. The effectiveness of the process may be associated with conditioning methods of these nanoparticles in biodegradable polymers to adjust the nutrient delivered. The development of films for sustainable packaging, optical protectors, or bactericides can be obtained through components from natural and biodegradable and/or waste sources to obtain nanostructures that favor reinforcement conditions for these nanocomposites, resulting in resistant products with added value. Thus, the present work seeks to elucidate ways to obtain and apply nanocomposites that improve their properties by adding synthetic or waste treatment nanostructures. Therefore, understanding the possibilities of reusing waste enables a gain with inestimable value since it makes it favorable to obtain environmentally friendly materials as an alternative to the circular economy.

Resumen. Los nanomateriales se vienen aplicando en diversas áreas de la sociedad y existe una demanda creciente para el desarrollo de sistemas con prestaciones superiores y menor coste. Los materiales obtenidos a partir de la valorización de residuos minerales y agrícolas ganan cada vez más espacio debido a la minimización del impacto ambiental y a la obtención de productos de segunda generación. En ambos casos, a partir de un adecuado tratamiento químico asociado a diferentes procesos es posible reutilizar, separar y obtener nuevos compuestos con propiedades activas. Los nanomateriales sintéticos obtenidos por fuentes comerciales, por otro lado, requieren el uso de fuentes precursoras que permitan el control estructural, morfológico y de reproducibilidad, lo que da lugar a un amplio abanico de investigaciones para la obtención de tecnologías más eficientes y de coste reducido. Los nanomateriales recuperables y reutilizables para la descontaminación del agua y el aire mediante procesos adsortivos y fotocatalíticos, que presentan una elevada área superficial, son candidatos prometedores para la remediación medioambiental. Además, las nanoestructuras pueden ser insertadas en sistemas poliméricos permitiendo el uso como películas y fibras nanocompuestas con propiedades únicas que favorecen la fácil recuperación en los procesos de aplicación, así como el uso en membranas antimicrobianas, barrera para radiación ultravioleta-visible, refuerzo mecánico y en la liberación de nutrientes agroindustriales. Las nanopartículas pueden utilizarse para el suministro de nutrientes minerales al suelo. La eficacia del proceso puede estar asociada a métodos de

acondicionamiento de estas nanopartículas en polímeros biodegradables para ajustar el nutriente suministrado. El desarrollo de films inteligentes para envases sostenibles, protectores ópticos o bactericidas puede obtenerse mediante componentes de origen natural y biodegradables, así como el aprovechamiento de residuos para la obtención de nanoestructuras que favorezcan las condiciones de refuerzo de estos nanocompuestos, dando lugar a productos resistentes y con valor añadido. Así, el presente trabajo pretende dilucidar algunas vías de obtención y aplicación de nanocompuestos que hayan visto mejoradas sus propiedades a partir de la adición de nanoestructuras sintéticas u obtenidas del tratamiento de residuos. De esta manera, comprender las posibilidades de reutilización de residuos permite una ganancia invaluable, ya que favorece la obtención de materiales amigables con el medio ambiente, como una alternativa a la economía circular.

Additive Manufacturing (AM)

Fabricación aditiva (AM)

Analysis of the mechanical and thermal properties of a polymeric matrix of tripropylene glycol diacrylate reinforced with pineapple fibers

Análisis de propiedades mecánicas y térmicas de una matriz polimérica de tripropilenglicol diacrilato reforzada con fibras de piña

C Calero Almeyda¹, R Cabanzo Hernández¹, A D Pertuz Comas¹, E Mejía Ospino¹, H A Estupiñan Duran², and E D V-Niño^{1,3}

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

³ Fundación of Researchers in Science and Technology of Materials, Bucaramanga, Colombia

E-mail: deydannv@gmail.com

Abstract. The purpose of this research work is to evaluate the performance of a composite material, additively manufactured by means of the laser stereolithography technique, of a polymeric matrix of tripropylene glycol diacrylate reinforced with natural pineapple fibers at different concentrations. In this aspect, from the analysis of the mechanical and thermal properties obtained in tensile tests and mechanical dynamic analysis, a significant change in the reinforced material in comparison with the unreinforced material is evidenced.

Resumen. El presente trabajo de investigación tiene como finalidad evaluar el desempeño de un material compuesto, fabricado aditivamente por medio de la técnica de estereolitografía laser, de matriz polimérica de tripropilenglicol diacrilato reforzada con fibras naturales de piña a diferentes concentraciones. En este aspecto, a partir del análisis de las propiedades mecánicas y térmicas obtenidas en ensayos de tracción y análisis dinámico mecánico se evidencia un cambio significativo del material reforzado en comparación con el material sin refuerzo.

Design and fabrication methodology for canine transmetatarsal prostheses by additive manufacturing

Metodología de diseño y fabricación para prótesis transmetatarsales en caninos por medio de manufactura aditiva

M J Baquero Ardila¹, J A Mantilla Villalobos¹, D F Villegas Bermudez¹, and C A Castellanos Parada¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: camilokp27@gmail.com

Abstract. A huge disadvantage in the daily life of any domestic animal is a limb absence, either by congenital or acquired disease, this situation prevents them from performing their usual activities properly and affects their owners emotionally. The importance of early post-trauma correction of this condition lies in the fact that various permanent musculoskeletal malformations may eventually occur as a result of improper posture and movement. Furthermore, the anatomical complexity of each case requires customized fabrication of a prosthesis, making the process costly and time-consuming. A proper solution for these requirements is provided by additive manufacturing, so in this paper we propose a design and fabrication methodology for low-cost customized prostheses applied to a case study, using computational modeling techniques and 3D printing as the main manufacturing method. We worked on the development of two transmetatarsal prostheses for a twelve-month-old female German Shepherd with absence of both hind limbs, to fulfill the function of the absent joints at tarsus level and accelerate the adaptation through the early device implementation. An initial amputated limb residual digitization was performed by photogrammetry to obtain the approximate geometry of each limb. Simultaneously, the biometry of the animal was taken in an anatomical position to make a comparison with the same breed canine in adult stage, in order to define the prosthesis dimensions and proceed with its design and modeling in a CAD software. Subsequently, the prostheses were manufactured by fused deposition modeling of flexible PLA+ with a focus on the variation of the filler density, with the purpose of modifying the mechanical properties in different sections of the impression, looking for rigidity in the support area and flexibility in the coupling with the residual limb. With the final implementation of the prostheses, a good fit was observed in the coupling with the limb, as well as a correct rigidity in the support validated by a stress-strain analysis by finite elements, which, combined with the structural design, has an impact on the proper posture and correct walking of the animal, concluding with a process of easy replicability and low cost that allows to obtain a quick solution for animals in a similar situation.

Resumen. Una gran desventaja en la vida cotidiana de cualquier animal doméstico es la ausencia de una extremidad, ya sea por una enfermedad congénita o adquirida, esta situación les impide realizar sus actividades habituales de manera adecuada y afecta emocionalmente a sus cuidadores. La importancia de corregir esta discapacidad a la mayor brevedad después del trauma radica en que eventualmente se presentan diversas malformaciones musco-esqueléticas permanentes a causa de posturas y movimientos inadecuados. Por otro lado, debido a la complejidad anatómica de cada caso, se hace necesaria la fabricación personalizada de una prótesis, haciendo que el proceso sea costoso y tardío. Una solución adecuada para estas condiciones es ofrecida por la manufactura aditiva, razón por la cual en este trabajo se propone una metodología de diseño y fabricación para prótesis personalizadas de bajo costo aplicada a un caso de estudio, utilizando técnicas de modelado computacional y la impresión 3D como principal método de manufactura. Se trabajó en el desarrollo de dos prótesis transmetatarsales para un pastor alemán hembra de doce meses con ausencia de ambas extremidades posteriores a nivel del tarso, a fin de que cumplan la función de las articulaciones ausentes en el animal, acelerando su adaptación a través de la temprana implementación del

dispositivo. Inicialmente se realizó la digitalización de los miembros residuales por fotogrametría para obtener la geometría aproximada de cada miembro, simultáneamente se realizaron tomas de la biometría del animal en posición anatómica para realizar una comparativa con un canino de su misma raza en etapa adulta, esto para definir las dimensiones de las prótesis y proceder con su diseño y modelado en un software CAD. Posteriormente se realizó la manufactura de las prótesis mediante el modelado por deposición fundida de PLA+ flexible con un enfoque en la variación de la densidad de relleno, a efectos de modificar las propiedades mecánicas en diferentes secciones de la impresión, buscando rigidez en la zona de apoyo y flexibilidad en el acople con el miembro residual. Con la implementación final de las prótesis se observó un buen ajuste en el acople con la extremidad residual, así como una correcta rigidez en el apoyo validada por un análisis de esfuerzo- deformación por elementos finitos, lo cual, junto con el diseño estructural, repercutió en la correcta postura y posterior caminata del animal, concluyendo con un proceso de fácil replicabilidad y bajo costo que permite obtener una solución rápida para animales en una situación similar.

Fatigue behavior prediction of additive manufacturing composites reinforced with long fibers using machine learning

Predicción del comportamiento a fatiga de materiales compuestos de manufactura aditiva reforzados con fibras largas usando machine learning

H D Sánchez Restrepo¹, C A Hernández Salazar¹, and O A González-Estrada¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: agonzale@uis.edu.co

Abstract. Additive manufacturing is a versatile manufacturing process that is quite useful for complex parts for which traditional methods would be difficult or outright impossible to fabricate. However, the technique has limitations associated with the low strength and stiffness characteristics of thermoplastic materials. For this reason, techniques such as fused deposition modeling have been discarded during the design process when functional load-bearing components are desired. In this research, experimental data from mechanical tests, tensile strength, and fatigue are analyzed to characterize the mechanical properties of continuous fiber reinforced thermoplastic composites. Nylon is used for the matrix filler, with triangular or hexagonal patterns. For reinforcement, fiberglass, carbon fiber, and kevlar are used, using concentric rings and reinforcement layers with fiber in different orientations. The data processing was done through machine learning, and regressions were obtained to characterize the behavior of the different compositions under the test stresses. The results showed that machine learning models were able to accurately predict the fatigue behavior of the composites with reasonable accuracy. Moreover, these models have the potential to be used for designing and optimizing composites produced by additive manufacturing processes.

Resumen. La manufactura aditiva es un proceso de fabricación versátil y útil para piezas complejas, para las cuales usar métodos tradicionales sería difícil o directamente imposible de fabricar. Sin embargo, la técnica presenta limitaciones asociadas a la baja resistencia y rigidez características de los materiales termoplásticos. Por esta razón, técnicas como el modelado por deposición fundida se han descartado durante el proceso de diseño, cuando se desea que dicho componente resista cargas funcionales. En esta investigación se analizan datos experimentales de ensayos mecánicos, de resistencia a tracción y fatiga, que permiten caracterizar las propiedades mecánicas de compuestos termoplástico reforzados con fibras continuas. Para la matriz se utiliza nylon y patrones de relleno triangulares o hexagonales. Para el refuerzo se utiliza fibra de vidrio, fibra de carbono y kevlar, usando anillos concéntricos y capas de refuerzo con fibra en diferentes orientaciones. El procesamiento de los datos obtenidos se hace utilizando machine learning, desarrollando regresiones para caracterizar el comportamiento mecánico de los compuestos bajo diferentes parámetros de proceso. Los resultados muestran que los modelos de aprendizaje automático son capaces de predecir el comportamiento a fatiga de los materiales compuestos con una precisión razonable. Además, estos modelos tienen el potencial de ser utilizados para diseñar y optimizar materiales compuestos producidos por procesos de fabricación aditiva.

Long-short-term memory networks to predict mechanical behavior of additive manufacturing composites reinforced with carbon fiber

Redes neuronales de memoria a corto plazo para predecir el comportamiento mecánico de materiales compuestos de fabricación aditiva reforzados con fibra de carbono

O A González-Estrada¹, C A Hernández Salazar¹, and E Lizarazo Sanchez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: edinson2228342@correo.uis.edu.co

Abstract. Continuous fiber-reinforced additive manufacturing composites have shown potential to improve the mechanical properties of 3D-printed polymers, but predicting their performance is a complex task due to their microstructure and various process parameters involved in their fabrication. Therefore, a long-short-term memory neural network is investigated to predict the mechanical properties, stiffness constants, and strength of continuous fiber-reinforced additive manufacturing. In this study, the results of experimental tensile tests on continuous carbon fiber additive manufacturing composites with variable volume fraction, printing direction, and fiber angle were used to train a long-short-term memory neural network. The predictive model was compared to a micromechanical model of stiffness and strength to assess the accuracy, ease of implementation, and generalization capabilities of the machine learning algorithm. The results suggest that the prediction of the mechanical properties of continuous fiber-reinforced additive manufacturing can be performed with reasonable accuracy.

Resumen. Los materiales compuestos de fabricación aditiva reforzada con fibra continua han demostrado potencial para mejorar las propiedades mecánicas de los polímeros impresos en 3D, pero predecir su desempeño es una tarea compleja debido a su microestructura y varios parámetros de proceso involucrados en su fabricación. Por lo tanto, se investiga una red neuronal de memoria a corto plazo para predecir las propiedades mecánicas, las constantes de rigidez y la fuerza de materiales compuestos de fabricación aditiva reforzada con fibra continua. En este estudio, se usaron los resultados de las pruebas experimentales de tracción en compuestos fabricados por manufactura aditiva de fibra de carbono continuo con fracción de volumen variable, dirección de impresión y ángulo de fibra para entrenar una red neuronal memoria a corto plazo. El modelo predictivo se comparó con un modelo micromecánico de rigidez y resistencia para evaluar la precisión, la facilidad de implementación y las capacidades de generalización del algoritmo de aprendizaje automático. Los resultados indican que la predicción de las propiedades mecánicas de materiales compuestos de fabricación aditiva reforzada con fibra continua se puede realizar con una precisión razonable.

Sample holder for X-ray diffraction: Bruker D8 Advance Eco diffractometer

Portamuestras para difracción de rayos X: difractoro Bruker D8 Advance Eco

V C Isaza Zapata¹, P Grimaldo Mendez¹, and D Betancur Chaverra¹

¹ Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

E-mail: daniel.betancur137@pascualbravo.edu.co

Abstract. Through this research, we sought to select and design a version of the already existing sample holders for the Bruker D8 Advance Eco diffractometer belonging to Institución Universitaria Pascual Bravo, which is used to determine structural characteristics of materials. In this sense, a design process was carried out in order to meet the needs evidenced by the institution when analyzing samples; therefore, the most adequate material was selected considering conditions such as weight, type of samples to be analyzed, radiation behavior, ease of manufacture, and cost. According to the above, PLA and AISI 304 stainless steel were chosen because they have adequate behavior to X-ray exposure (radiolucent and radiolucent) and because the sample holder would not interfere with the reading of the measurements. After this, a removable sample holder design was proposed in CAD that allowed us to investigate conditions for the evaluation of the phase as a modification. of the height, the amount of volume, measurement surface, among others. Therefore, with this sample holder it was possible to modify the main geometry of the sample holder base considering the above and depending on whether the sample to be studied was solid (block) or powder. Once the final design was established, it was decided to manufacture the PLA sample holder through additive manufacturing of 3D printing. Diffraction tests for silicon oxide and aluminum oxide were carried out and the phases were analyzed, verifying the quality of the results. After this, it was possible to show that the results of the diffraction patterns of both oxides corresponded to those that should be obtained, which was an important result, considering that the sample holder made with PLA has an approximate cost of 1,500 times less than those offered by the manufacturer.

Resumen. A través de esta investigación se buscó seleccionar y diseñar una versión de los portamuestras ya existentes para el difractoro Bruker D8 Advance Eco perteneciente a la Institución Universitaria Pascual Bravo, el cual es utilizado para determinar características estructurales de los materiales. En este sentido, se tuvo un proceso de diseño buscando suplir las necesidades evidenciadas que ha tenido la institución a la hora de analizar las muestras; por ello, se realizó la selección del material más adecuado considerando condiciones como: peso, tipo de muestras que se van a analizar, comportamiento ante la radiación, facilidad de fabricación y costo. Según lo expuesto anteriormente, se eligió el PLA y el acero inoxidable AISI 304 por tener un comportamiento adecuado a la exposición de rayos x (radiotransparentes y radiolucientes) y porque el portamuestras no interfiría en la lectura de las medidas. Posterior a esto, se planteó un diseño de portamuestras desmontable en CAD que nos permitió investigar condiciones para la evaluación de la fase como modificación de la altura, la cantidad de volumen, superficie de medición, entre otros. Por ello con este portamuestras fue posible modificar la geometría principal de la base del portamuestras considerando lo anterior y dependiendo si la muestra a estudiar era sólida (bloque) o en polvo. Una vez establecido el diseño final se decidió fabricar el portamuestras de PLA mediante manufactura aditiva de impresión 3D. Fueron realizados ensayos de difracción para óxido de silicio y óxido de aluminio y se analizaron las fases constatando la calidad de los resultados. Posterior a esto, se pudo evidenciar que los resultados de los patrones de difracción de ambos óxidos correspondían a los que debían que ser obtenidos, lo cual fue un resultado importante, considerando que el portamuestras fabricado con PLA tiene un costo aproximado de 1.500 veces menor que los ofrecidos por el fabricante.

Characterization of Materials (CM)

Caracterización de Materiales (CM)

Affectation in fatigue resistance in stainless steels with welded joints

Afectación en la resistencia a la fatiga en aceros inoxidable con juntas soldadas

O R Bohórquez Becerra¹, A D Pertuz Comas¹, and J F González Rodríguez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: jhonfredygonzalezrodriguez@gmail.com

Abstract. Steel is very useful for many sectors nowadays, it is characterized as being hard and resistant, besides having great malleability. This material is in great demand in industries such as automotive, power generation, pharmaceutical, and food. They also make use of stainless steel, which has similar characteristics to those mentioned above with the addition that they are resistant to corrosion, in addition, they can be austenitic, martensitic, or ferritic. On the other hand, being such a demanded material, it is necessary to optimize the processes of transport, cutting, welding, and material saving, in order to generate advances in the metal- mechanical industry. Welding is a process that is carefully analyzed, the most appropriate method must be chosen for the material, looking for the best mechanical properties in critical test conditions. Therefore, to achieve these standards, the material was experimented with in controlled environments under international standards, the analysis was performed on 316L stainless steel with a welded joint, by the GMAW welding process, the main objective was to analyze the welded joint, and the changes that may occur with respect to the control material, which in this case was the initial material without the welded joint, the material was taken to critical loading conditions, with tensile tests that allowed to continue with the research delivering values of elastic limit. In this way, fatigue was performed at 4 stress levels associated with the yield stress for the analysis based on Basquin's model, it was observed how the structure changed when it was taken to the limit with this type of destructive test. In obtaining the specimens, the welding parameters for the working conditions initially proposed were sought, following the indications of the material manufacturer, a material metallurgically similar to the base plate was used as welding material. The GMAW welding process was carried out under the standards of the AWS D1.1 norm, with an automatic electromechanical system with constant displacement, on a horizontal surface, for the cutting of the specimens was guaranteed not to thermally affect the samples. Micrographs were taken with an optical microscope, for this process, it was required a treatment of samples in which they were roughened by hand with abrasive paper, then the material was attacked with reagent according to ASTM E407 standard, for proper visualization of the microstructural changes. Therefore, from the study of the micrographs results were obtained, comparing the formation of microstructures predicted by the Schaeffler diagram with the analysis performed on the images of the material. The analysis of the welded joint showed a notable difference with respect to the control material with each of the studies performed, but in the microstructures, changes in the material were noted that affected the corrosion resistance properties of the material used for this work. On the other hand, it was compared, and a relationship was established between the equations obtained by the fatigue analysis model, with this relationship it can be set numerically how much the change between the welded material and the control material with the fatigue test.

Resumen. El acero es muy útil para muchos sectores hoy en día, se caracteriza por ser duro y resistente, además de tener una gran maleabilidad. Este material es muy demandado en industrias como la automoción, la generación de energía, la farmacéutica y la alimentaria. También hacen uso del acero inoxidable, que tiene características similares a las mencionadas anteriormente con el añadido de que son resistentes a la corrosión, además, pueden ser austeníticos, martensíticos o ferríticos. Por otro lado, al ser un material tan demandado, es necesario optimizar los procesos de transporte, corte, soldadura y ahorro de material, para generar avances en la industria metalmeccánica. La soldadura es un proceso que se analiza cuidadosamente, se debe elegir el método más adecuado para el material, buscando las mejores propiedades mecánicas en

condiciones críticas de ensayo. Por lo tanto, para lograr estos estándares, se experimentó con el material en ambientes controlados bajo normas internacionales, el análisis se realizó en acero inoxidable 316L con una unión soldada, por el proceso de soldadura GMAW, el objetivo principal fue analizar la unión soldada, y los cambios que pueden ocurrir con respecto al material de control, que en este caso fue el material inicial sin la unión soldada, el material fue llevado a condiciones críticas de carga, con ensayos de tracción que permitieron continuar con la investigación entregando valores de límite elástico. De esta manera, se realizó la fatiga a 4 niveles de tensión asociados al límite elástico para el análisis basado en el modelo de Basquin, se observó como cambiaba la estructura al ser llevada al límite con este tipo de ensayo destructivo. En la obtención de las probetas se buscaron los parámetros de soldadura para las condiciones de trabajo propuestas inicialmente, siguiendo las indicaciones del fabricante del material, se utilizó como material de soldadura un material metalúrgicamente similar a la placa base. El proceso de soldadura GMAW se realizó bajo los estándares de la norma AWS D1.1, con un sistema electromecánico automático con desplazamiento constante, sobre una superficie horizontal, para el corte de las probetas se garantizó no afectar térmicamente a las muestras. Las micrografías fueron tomadas con un microscopio óptico, para este proceso, se requirió de un tratamiento de las muestras en el cual fueron desbastadas a mano con papel abrasivo, posteriormente el material fue atacado con reactivo de acuerdo a la norma ASTM E407, para la correcta visualización de los cambios microestructurales. Así, a partir del estudio de las micrografías se obtuvieron resultados, comparando la formación de microestructuras predicha por el diagrama de Schaeffler con el análisis realizado sobre las imágenes del material. El análisis de la unión soldada mostró una diferencia notable respecto al material control con cada uno de los estudios realizados, pero en las microestructuras se observaron cambios en el material que afectaron a las propiedades de resistencia a la corrosión del material utilizado para este trabajo. Por otro lado, se comparó y se estableció una relación entre las ecuaciones obtenidas por el modelo de análisis de fatiga, con esta relación se puede establecer numéricamente cuanto es el cambio entre el material soldado y el material control con el ensayo de fatiga.

A first principles study of the CO₂ capture by small copper clusters

Estudio de primeros principios de la captura de CO₂ por pequeños clústeres de cobre

C A Mena Coronado¹, L A Alcalá Varilla¹, and F J Torres Hoyos¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: ftorres@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. The CO₂ adsorption on small copper clusters (Cu_N, N=2-5 atoms) was studied using density functional theory under the generalized gradient approximation of Perdew-Burke-Ernzerhof, the Hubbard U correction and considering the Van der Waals interactions. We found that chemisorption is not possible when the copper cluster only has two atoms, while for systems with three or more atoms, CO₂ can be chemisorbed. We report here the CO₂/Cu_N structures that present chemisorption and for them we also calculated the structural and electronics properties and the phonon density of state. We can conclude that the adsorption of CO₂ on the small copper clusters could favor the dissociation of CO₂.

Resumen. La adsorción de CO₂ en pequeños clústeres de cobre (Cu_N, N=2-5 átomos) se estudió utilizando la teoría del funcional de la densidad bajo la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof, la corrección Hubbard U y considerando las interacciones de Van der Waals. Se encontró que la quimisorción no es posible cuando el clúster de cobre solo tiene dos átomos, mientras que, para sistemas con tres o más átomos, el CO₂ si puede ser quimisorbido. Reportamos aquí las estructuras CO₂/Cu_N que presentan quimisorción y para ellas también calculamos las propiedades estructurales y electrónicas y la densidad de estados de fonones. Podemos concluir que la adsorción de CO₂ sobre pequeños clústeres de cobre podría favorecer la disociación de CO₂.

Analysis of static and fatigue properties of bio-based epoxy composites reinforced with woven fique, jute, and flax fibers

Análisis de las propiedades estáticas y de fatiga de compuestos con matriz de resina en base natural reforzada con fibras tejidas de fique, yute y lino

J D Castro Bermudez¹, and A D Pertuz Comas¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: apertuzc@uis.edu.co

Abstract. In recent decades, bio-composites have emerged as a sustainable alternative to traditional low-stress designs. The use of natural fibers as construction materials has gained popularity due to its low cost, environmental friendliness, and agro-industrial benefits. Among these fibers, fique, jute, and flax have been commonly used as reinforcing materials in combination with epoxy resin matrix, resulting in improved maximum stress values in composite materials. Moreover, the investigation of the dynamic properties of biocomposites has become an innovative research field. The use of classic methodologies such as the Basquin's model has enabled the definition of the S-N curve to predict high-cycle behavior with reduced experimental tests. This research aims to analyze the static and dynamic behavior of a bio-based resin reinforced with woven fibers of jute, fique, and flax. The study evaluates the Young's modulus, ultimate strength, and strain of the three composites, with fique and flax fibers yielding the best results. Furthermore, fatigue tests were performed on fique and flax composites, and an S-N curve was obtained to predict the high-cycle behavior of the materials.

Resumen. En las últimas décadas, los bio-compuestos han surgido como una alternativa sostenible a los diseños tradicionales de baja resistencia. El uso de fibras naturales como materiales de construcción ha ganado popularidad debido a su bajo costo, amigabilidad con el medio ambiente y beneficios agroindustriales. Entre estas fibras, fique, yute y lino se han utilizado comúnmente como materiales de refuerzo en combinación con una matriz de resina epoxi, lo que resulta en valores mejorados de resistencia máxima en materiales compuestos. Además, la investigación de las propiedades dinámicas de los bio-compuestos se ha convertido en un campo de investigación innovador. El uso de metodologías clásicas como el modelo Basquin ha permitido la definición de la curva S-N para predecir el comportamiento de alta frecuencia con pruebas experimentales reducidas. Esta investigación tiene como objetivo analizar el comportamiento estático y dinámico de una resina a base de materiales biológicos reforzada con fibras tejidas de yute, fique y lino. El estudio evalúa el módulo de Young, la resistencia última y la deformación de los tres compuestos, con fibras de fique y lino que proporcionan los mejores resultados. Además, se realizaron pruebas de fatiga en compuestos de fique y lino, y se obtuvo una curva S- N para predecir el comportamiento de alta frecuencia de los materiales.

Characterization of a pumice stone geopolymer and its selectivity in the removal of ionic contaminants

Caracterización de un geopolímero de piedra pómez y su selectividad en la remoción de un contaminante iónico

G C Barón Gualdrón¹, A M Montaña Angarita¹, C P González Cuervo², D A Jerez Santamaria¹, and J M Urbina¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

E-mail: giselle.baron@correo.uis.edu.co

Abstract. Geopolymers are inorganic materials that are the product of the reaction of aluminosilicates in the presence of an alkaline activator, which promotes the dissolution of the precursor, allowing the formation of monomers that subsequently form a three-dimensional red. The various uses in which they can be implemented extend to the range of materials with adsorbent characteristics, which have been studied in recent years, with selectivity being one of the most important characteristics when performing removal in real systems, since that from it appeared, the efficiency of water decontamination for specific contaminants. The present work proposes the selectivity of a pumice-based geopolymeric material to remove ionic contaminants in wastewater, finding that the synthesized geopolymer removes up to 38% methylene blue, 25% methyl orange and 20% methyl violet in 90 minutes, which is indicative that the geopolymeric material has a tendency to retain the methylene blue dye in a higher proportion, this may be due to the volume of the molecule and the fact that its residual charge stabilizes the structure of the material polymeric, itself through the characterization techniques the morphological and structural change of the raw material is evidenced, which indicates that the polymerization process is carried out successfully and through the BET methodology we can observe that the average size of the pores in the material is 19 nm and can be classified as a mesoporous material

Resumen. Los geopolímeros son materiales inorgánicos producto de la reacción de aluminosilicatos en presencia de un activador alcalino, el cual fomenta la disolución del precursor permitiendo la formación de monómeros que posteriormente forman una red tridimensional. Los diversos usos en los que se pueden implementar se amplían al rango de materiales con características adsorbentes, los cuales han venido estudiándose en los últimos años, siendo la selectividad una de las características de mayor importancia al momento de realizar la remoción en sistemas reales, ya que de ella dependerá, la eficiencia de la descontaminación de aguas para contaminantes específicos. El presente trabajo plantea el estudio de la selectividad de un material geopolimérico a base de piedra pómez para remover contaminantes iónicos en aguas residuales, encontrándose que el geopolímero sintetizado remueve hasta un 38% de azul de metileno 25% de naranja de metilo y 20% de metil violeta en 90 minutos, lo cual es indicativo que el material geopolimérico posee una tendencia a retener con mayor proporción el colorante azul de metileno, esto puede ser debido al volumen de la molécula y al hecho que su carga residual estabiliza la estructura del material polimérico, asimismo mediante las técnicas de caracterización se evidencia el cambio morfológico y estructural de la materia prima, lo cual indica que el proceso de polimerización se lleva a cabo exitosamente y mediante la metodología BET podemos observar que el tamaño promedio de los poros en el material es de 19 nm pudiéndolo clasificar como un material mesoporoso.

Characterization of industrial waste of titanium foundry grade 5 for application in parts of the automotive industry

Caracterización de residuo industrial de fundición de titanio grado 5 para aplicación en piezas de la industria automotriz

V C Isaza Zapata¹, D Arango Aguiar¹, F Perez Mejia¹, and D Callejas¹

¹ Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

E-mail: d.callejas1832@pascualbravo.edu.co

Abstract. Through this investigation, suitable conditions were found for the recovery of pure titanium ASTM F67-06 and grade 5 alloyed titanium ASTM F136-08 residues, both surgical alloys and from die-cutting and machining processes. The company Industrias Medicas San Pedro. The main function of these pieces is to replace bone parts such as the face, skull, and maxillofacial section. The residual material was cataloged to be used in the construction of titanium parts for the automotive industry. For this, a chemical-mechanical (metallographic) polishing process was carried out, which allowed the revelation of the alpha phase of pure titanium and grade 5 titanium in the hard Widmanstätten phase. It is concluded that, although the material suffered deformations due to mechanical processes, this at the microstructural phase level remained stable and did not generate compositional changes in the material to be used. Once the composition remained stable, the use of the vacuum casting technique was theoretically proposed to obtain a chemically stoichiometric and uniform casting for the reproduction of parts.

Resumen. A través de esta investigación se encontraron las condiciones adecuadas para la recuperación de residuos de titanio puro ASTM F67-06 y titanio aleado grado 5 ASTM F136-08, ambas aleaciones de carácter quirúrgico y procedentes de procesos de troquelado y maquinado de la empresa Industrias Medicas San Pedro. La función principal de estas piezas es en el reemplazo de partes óseas como rostro, cráneo y sección maxilofacial. El material residual fue catalogado a ser aprovechado en la construcción de piezas en titanio de la industria automotriz. Para ello se realizó proceso de pulido químico-mecánico (metalográfico), el cual permitió la revelación de la fase alfa de titanio puro y titanio grado 5 en fase Widmanstätten dura. Se concluye que, aunque el material sufrió deformaciones por procesos mecánicos, este a nivel de fase microestructural se mantuvo estable y no generó cambios composicionales en el material a ser aprovechado. Una vez la composición se mantuvo estable, se planteó teóricamente el uso de la técnica de vaciado al vacío para obtener una colada químicamente estequiométrica y uniforme para reproducción de piezas.

Characterization of nickel cobaltite nanoparticles obtained by sol-gel technique: optical and structural study

Caracterización de nanopartículas de cobaltita de níquel obtenidas por la técnica sol-gel: estudio óptico y estructural

M Rincón Joya¹, and L J Cardenas Flechas²

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia

E-mail: leydi.cardenas@profesores.uamerica.edu.co

Abstract. This study examines the characteristics of cobalt oxide and nickel cobaltite prepared via the citrate sol-gel technique at 1000 °C. The goal is to optimize the deposition process for gas sensors that can detect acetone, a diabetes biomarker, by exploring the effect of different nickel percentages in the compound. XRD, FT-IR, SEM, and UV-Vis techniques were employed to characterize the samples. The results indicate the presence of NiCo₂O₄ and CoO, shifts in the characteristic peaks of nickel cobaltite due to doping, and variations in particle size and band gap values depending on the nickel concentration. In summary, the study shows that doping can significantly influence material properties, with potential implications for gas sensor design and development in biomedical applications.

Resumen. En este estudio se examinan las características del óxido de cobalto y la cobaltita de níquel preparados mediante la técnica sol-gel de citrato a 1000 °C. El objetivo es optimizar el proceso de deposición para sensores de gas que puedan detectar acetona, un biomarcador de la diabetes, explorando el efecto de diferentes porcentajes de níquel en el compuesto. Para caracterizar las muestras se emplearon técnicas de DRX, FT-IR, SEM y UV-Vis. Los resultados indican la presencia de NiCo₂O₄ y CoO, desplazamientos en los picos característicos de la cobaltita de níquel debidos al dopaje, y variaciones en el tamaño de partícula y en los valores de band gap en función de la concentración de níquel. En resumen, el estudio demuestra que el dopaje puede influir significativamente en las propiedades del material, con posibles implicaciones para el diseño y desarrollo de sensores de gas en aplicaciones biomédicas.

Characterization of structural and electronic properties of zinc oxide with cerium impurities

Caracterización de propiedades estructurales y electrónicas del óxido de zinc con impurezas de cerio

Á D C Doria Hernández¹, J D Ortiz Romero¹, and L A Alcalá Varilla¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: lalcala@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. In this work we have investigated the effects of cerium impurities on the structural and electronic properties of zinc oxide in its wurtzite phase, for the bulk and surface (001) of pure zinc oxide and the $Zn_xCe_{(1-x)}O$ doped system, this to determine the possible improvements in the photocatalytic activity that Ce produces in the zinc oxide system. The calculations were made using the density functional theory within the generalized gradient approximation of Perdew-Burke-Ernzerhof, together with ultrasmooth atomic pseudopotentials and a plane wave base as implemented in the Quantum-ESPRESSO package. The doping concentration levels considered in this work were 12.5% for the bulk, and 6.25% for the surface. It was found that when adding cerium impurities to zinc oxide, the structural parameters slightly changed, changes were also presented in the electronic properties of the material, appearing intermediate states in the forbidden energy band, located around the Fermi energy. This may suggest that probably the $Zn_{0.875}Ce_{0.125}O$ and $Zn_{0.9375}Ce_{0.0625}O$ systems can absorb visible light, which could lead to possible improvements in the photocatalytic properties of the material.

Resumen. En este trabajo se han investigado los efectos de impurezas de cerio sobre las propiedades estructurales y electrónicas del óxido de zinc en su fase wurtzita, para el bulk y la superficie (001) de óxido de zinc puro y el sistema dopado $Zn_xCe_{(1-x)}O$, esto para determinar las posibles mejoras en la actividad fotocatalítica que produce el cerio al sistema de óxido de zinc. Los cálculos se realizaron usando la teoría del funcional de la densidad dentro de la aproximación del gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof junto con pseudopotenciales atómicos ultrasuaves y una base de ondas planas como se implementa en el paquete Quantum-ESPRESSO. Los niveles de concentración de dopaje considerados en este trabajo fueron de 12,5% para el bulk, y 6,25% para la superficie. Se encontró que, al adicionar impurezas de cerio al óxido de zinc, cambiaron ligeramente los parámetros estructurales, también se presentaron cambios en las propiedades electrónicas, los cuales consisten en estados intermedios en la banda prohibida de energía, ubicados alrededor de la energía de Fermi. Lo anterior, puede sugerir que probablemente los sistemas $Zn_{0.875}Ce_{0.125}O$ y el $Zn_{0.9375}Ce_{0.0625}O$ puedan absorber luz visible, lo cual podría conllevar a posibles mejoras en las propiedades fotocatalíticas del material.

Characterization of the nopal as a plant species cultivated in Boyacá, Colombia as a potential corrosion inhibitor

Caracterización del nopal como especie vegetal cultivada en Boyacá, Colombia como potencial inhibidor de corrosión

M G Lara Cusba¹, C G Hernández Carrillo¹, Y Pineda Triana¹, R D J Torres Gómez¹, and L Mujica Roncery¹

¹ Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: lais.mujica@uprc.edu.co

Abstract. Corrosion inhibitors have generated a remarkable effectiveness in the protection of the corrosive reaction to the different environmental conditions of steels, especially those destined to engineering functions. Likewise, it is necessary the production of raw materials corresponding to the search for environmental sustainability. Specifically, cacti plant species. However, despite its wild growth throughout the Colombian territory, it is little used and its physicochemical behavior is not clear. Therefore, this research proposes the development of a corrosion inhibitor extracted from the plant species *Opuntia Ficus Indica* grown in Boyacá, in order to establish its use as a potential corrosion inhibitor, by understanding the chemical phenomena present. For this purpose, the species was initially characterized botanically to control the components and later a bromatological analysis was performed to define compounds that establish potential physicochemical phenomena and then Thermogravimetric Analysis was carried out. Initially, the results show that approximately 95% of the plant is composed of water, which is related to the high potential for electrostatic interaction. This was evaluated by infrared and Raman spectroscopy analysis, which allowed the semiquantitative evaluation of the presence of hydroxyl and carboxyl functional groups that compose polysaccharide chains, which corresponds to approximately 85% of the total composition according to the bromatological analysis. This is related to the results of the zeta potential and the generation of a large interface that allows reducing the electrochemical reactions causing corrosive effects.

Resumen. Los inhibidores de corrosión han generado una efectividad notable en la protección de la reacción corrosiva ante las diferentes condiciones ambientales de los aceros, especialmente los destinados a funciones ingenieriles. Asimismo, es necesario la producción de materias primas correspondiente a la búsqueda de la sostenibilidad ambiental. Específicamente las especies vegetales cactáceas. Sin embargo, pese a su crecimiento de forma silvestre en todo el territorio colombiano, esta es poco utilizada y no es claro el comportamiento fisicoquímico. Por lo anterior, la presente investigación plantea el desarrollo de un inhibidor de corrosión extraído de la especie vegetal *Opuntia Ficus Indica* crecida en Boyacá, con el fin de establecer su uso como potencial inhibidor de corrosión, mediante el entendimiento de los fenómenos químicos presentes. Para esto inicialmente se caracterizó botánicamente la especie para el control de componentes y posteriormente un análisis bromatológico para definir compuestos que establezcan potenciales fenómenos fisicoquímicos y posteriormente se realizaron Análisis Termogravimétricos. Inicialmente, los resultados muestran que aproximadamente el 95% de la planta está compuesta de agua, lo cual se relaciona con el alto potencial de la interacción electrostática. Esto se evaluó mediante análisis de espectroscopia infrarroja y Raman, lo que permitió la evaluación semicuantitativa de la presencia de grupos funcionales hidróxido y carboxilo que componen cadenas de polisacáridos, que corresponde aproximadamente al 85% de la composición total según el análisis bromatológico. Lo anterior se relaciona con los resultados del potencial zeta y la generación de una gran interfase que permite reducir las reacciones electroquímicas causante de efectos corrosivos.

Characterizations of $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ multiferroic particulates composites in 80/20 and 50/50 molar proportional by microwave-assisted method

Caracterización del compuesto multiferroico de $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ particulado en las proporciones molares de 80/20 y 50/50 sinterizado por el método de calentamiento ultrarrápido de microondas

K Parra-Jimenez¹, C García-Negrete¹, C P Fernandez Perdomo², R H G A Kiminami², D Garcia², and A J Aparecido de Oliveira²

¹ Universidad Del Sinu - Elias Bechara Zainum, Montería, Colombia

² Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, Brazil

E-mail: adilson@df.ufscar.br

Abstract. In this work, we present a studied of the electric and magnetic properties in $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ of the multiferroic particulate composite; the samples were synthesized Pechini method with two different concentration (80/20 and 50/50). After synthesis the samples were pressed and sintered in an ultrafast microwave-assisted sintering and in a conventional furnace sintering. The structure and microstructure of the sintered samples were analyzed, respectively, by X-ray diffraction and scanning electron microscopy. The dielectric constant as a function of temperature, electrical resistivity, ferroelectric hysteresis, magnetic hysteresis, magnetostriction effect, and magnetoelectric coupling coefficient were measured. The micrographs indicated that sintering resulted in globally connected particle composites (0-3) and a uniform distribution of the ferromagnetic phase grains CoFe_2O_4 in the ferroelectric matrix $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3$. The characterizations revealed high values of resistivity indicated that both sintering methods preserved the integrity of the two phases. The dielectric constant of the samples increased with increasing temperature and peaked at a particular temperature, temperature Curie, which is characteristics of ferroelectric behavior. The results revealed that for the two fractions of cobalt ferrite in the composite (80/20 and 50/50), the dielectric constant and transition temperature decreased by microwave-assisted sintering. The electric polarization saturation (ferroelectric hysteresis) for microwave-assisted sintering was lower than conventional furnace sintering. The saturation magnetization (magnetic hysteresis) for microwave-assisted sintering was higher than conventional furnace sintering. The magnetostriction coefficients as a function magnetic field for microwave-assisted sintering was lower than conventional furnace sintering, and the magnetoelectric susceptibility for microwave-assisted sintering was higher than conventional furnace sintering, the values were dependent on the ferrite phase concentration and sintering. The microwave sintering was more efficient, ensuring the magnetoelectric behavior of all the composites under study.

Resumen. En este trabajo se analizaron las propiedades eléctricas y magnéticas del compuesto multiferroico de $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ particulado; las muestras se sintetizaron por el método Pechini para dos concentraciones diferentes (80/20 y 50/50). Posterior a la síntesis, los sistemas fueron sinterizados por el método ultrarrápido de calentamiento por microondas y por un horno convencional. Las caracterizaciones estructurales, microestructurales de las muestras sinterizadas se analizaron, respectivamente, mediante la difracción de rayos X y microscopía electrónica de barrido. Se midieron la constante dieléctrica en función de la temperatura, la resistividad eléctrica, la histéresis ferroeléctrica, la histéresis magnética, el efecto de magnetostricción y el coeficiente de acoplamiento magnetoeléctrico. Las micrografías indicaron que la

sinterización dio lugar a compuestos de particulados, además presentaron de forma general una conectividad entre las fases constituyentes (0-3) y a una distribución uniforme de los granos de la fase ferromagnética CoFe_2O_4 en la matriz ferroeléctrica $\text{Pb}(\text{Zr}_{0,52}\text{Ti}_{0,48})\text{O}_3$. Los resultados mostraron altos valores de resistividad eléctrica que indicaban que ambos métodos de sinterización preservaban la integridad de las dos fases. La constante dieléctrica de las muestras aumentó con el incremento de la temperatura y alcanzó su máximo a una temperatura determinada, la temperatura Curie, característica del comportamiento ferroeléctrico. Los resultados revelaron que para las dos fracciones de ferrita de cobalto en el compuesto (80/20 y 50/50), la constante dieléctrica y la temperatura de transición disminuían por la sinterización por microondas. La saturación de polarización eléctrica (histéresis ferroeléctrica) para sinterización por microondas fue inferior a la de horno convencional. La magnetización de saturación (histéresis magnética) de sinterización por microondas fue superior a la de horno convencional. Los coeficientes de magnetostricción en función del campo magnético de sinterización por microondas fueron inferiores a los de horno convencional, y la susceptibilidad magnetoeléctrica de sinterización por microondas fue superior a la de horno convencional; los valores dependieron de la concentración de la fase ferrita de cobalto y de la sinterización. La sinterización por microondas fue más eficaz, garantizando el comportamiento magnetoeléctrico de todos los compuestos estudiados.

Chitosan-activated carbons: an option for the manufacture of low-cost supercapacitor electrodes

Carbones activados de quitosano: una opción para la fabricación de electrodos de supercapacitores de bajo costo

M Y Ferrer Pacheco¹, E J Vera¹, and H J Dulce Moreno¹

¹ Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

E-mail: hectorjaimedm@ufps.edu.co

Abstract. Activated carbon is obtained from commercial chitosan by the hydrothermal carbonization method, assisted with phosphoric acid and subsequent physical activation at temperatures of 500 °C, 700 °C and 900 °C. The obtained coals were characterized physically and chemically with techniques such as: thermogravimetric analysis, Fourier transform infrared spectroscopy, energy dispersion spectrometry and scanning electron microscopy. Surface area and pore size were determined from nitrogen sorption and desorption analysis. The electrochemical properties were evaluated by voltametric tests in a three-electrode cell with a 1M hydrochloric acid electrolyte, for which activated carbon working electrodes and copper tape were fabricated. Coals with a pore size of less than 2 nm were obtained, indicating that they are microporous coals. The highest surface area was presented by the activated carbon at 900 °C, 627.423 m²/g, which also had the highest specific capacitance of 346 μF/g. The hydrothermal carbonization method combined with physical activation was found to be efficient to produce activated carbons from chitosan, with large surface areas, of great importance for the fabrication of supercapacitor electrodes.

Resumen. Se obtiene carbón activado a partir de quitosano comercial por el método de carbonización hidrotermal, asistido con ácido fosfórico y posterior activación física a temperaturas de 500 °C, 700 °C y 900 °C. Los carbones obtenidos se caracterizaron física y químicamente con técnicas como: análisis termogravimétrico, espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier, espectrometría de dispersión de energía y microscopía electrónica de barrido. El área superficial y el tamaño de poro, se determinaron a partir de análisis de sortometría mediante la sorción y desorción de nitrógeno. Las propiedades electroquímicas se evaluaron mediante pruebas voltamperométricas, en una celda de tres electrodos con un electrolito de ácido clorhídrico 1M, para lo cual se fabricaron electrodos de trabajo de carbón activado y cinta adhesiva de cobre. Se obtuvieron carbones con un tamaño de poro inferior a 2 nm, lo que indica que son carbones microporosos. La mayor área superficial la presentó el carbón activado a 900 °C, 627,423 m²/g, el cual también tuvo la mayor capacitancia específica de 346 μF/g. Se encontró que el método de carbonización hidrotermal combinado con activación física es eficiente para producir carbones activados a partir de quitosano, con áreas superficiales amplias, de gran importancia para la fabricación de electrodos supercapacitores.

Consequences of adding small copper clusters on the 001 surfaces of anatase

Consecuencias de agregar pequeños clústeres de cobre sobre superficies 001 de anatasa

L A Alcalá Varilla¹, F J Torres Hoyos¹, and N De La Espriella Vélez¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia,

E-mail: ndelaespriella@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. Using first-principles simulations based on the density functional theory under the generalized gradient approximation of Perdew- Burke-Ernzerhof, the Hubbard U correction and considering the Van der Waals interactions, we have investigated the effects that produce to add small copper clusters (CuN, N=1-4 atoms) on the 001 surfaces of anatase. It has been found that the main effects of copper clusters on the electronic properties of anatase are to produce midgap states of two different way. The first are Cu-Ti bonds and the second are Ti³⁺ polarons states. Here, we discuss how these states could improve the photocatalytic activity of anatase.

Resumen. Usando simulaciones de primeros principios basadas en la teoría del funcional de la densidad bajo la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof, la corrección Hubbard U y considerando las interacciones de Van der Waals, hemos investigado los efectos que produce agregar pequeños clústeres de cobre (CuN, N = 1-4 átomos) en las superficies 001 de anatasa. Se ha encontrado que los principales efectos de los clústeres de cobre sobre las propiedades electrónicas de la anatasa son producir estados intermedios, en la banda prohibida de energía, de dos maneras diferentes. El primero son enlaces Cu-Ti y el segundo son estados de polarones Ti³⁺. Aquí, discutimos cómo estos estados podrían mejorar la actividad fotocatalítica de la anatasa.

Current effect on the critical parameters from paraconductivity analysis for the high-temperature superconductor $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

Efecto de la corriente en el cálculo de los parámetros críticos a partir del análisis de la para conductividad para el superconductor de alta temperatura $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

J Roa-Rojas¹, E M Vargas-Pineda¹, L J Rivera Contreras¹, and D A Landinez Tellez¹
¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: dalandinez@unal.edu.co

Abstract. Using the solid-state reaction, the high temperature superconducting material $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ was synthesized and his resistive behavior was studied as a function of temperature under the application of seven different electric currents to report the results obtained from the analysis of the paraconductivity (excess of conductivity) fluctuations in the phase transition from the normal state to the superconducting state of a ceramic sample. Through the resistive behavior of the sample in the pairing, the critical superconducting parameters characterizing the of ceramic $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ were determined: penetration length, coherence length, critical magnetic fields one and two, critical current density, jump in specific heat at the superconducting transition and Ginzburg parameter which are not affected by the variation in the applied current. This talk will show the method used to perform the experimental characterization of a high critical temperature superconducting material and will review the most relevant aspects of the Ginzburg and Landau theory.

Resumen. Por medio de la reacción de estado sólido se sintetizó el material superconductor de alta temperatura $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ para la cual se estudió el comportamiento resistivo en función de la temperatura bajo se la aplicación de siete corrientes eléctricas diferentes para reportar los resultados obtenidos del análisis de las fluctuaciones de para conductividad (exceso de conductividad) en la transición de fase del estado normal al estado superconductor de una muestra cerámica. A través del comportamiento resistivo de la muestra en la región de apareamiento en la transición superconductora, se logró la determinación de los parámetros críticos superconductores que caracterizan la cerámica $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$: longitud de penetración, longitud de coherencia, campos magnéticos críticos uno y dos, densidad de corriente crítica, salto en el calor específico en la transición superconductora y parámetro de Ginzburg los cuales no se ven afectados por la variación en la corriente aplicada. En esta charla se mostrará el método usado para realizar la caracterización experimental de un material superconductor de alta temperatura crítica y se hará una revisión sobre los aspectos más relevantes de la teoría de Ginzburg y Landau.

Development of a measurement system to quantify electrical resistivity in solid materials

Desarrollo de un sistema de medición para cuantificar la resistividad eléctrica en materiales sólidos

C A Parra Vargas¹, D A Moreno Preciado¹, J A Cuervo Farfán¹, E Cuervo¹,
F R Jiménez López¹, and O H Sierra Herrera¹

¹ Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: oscar.sierra@uptc.edu.co

Abstract. Measurement of the electrical resistance of a material is very important when characterizing it because some of its possible technological applications can be glimpsed. To carry out these measurements it is necessary to have some way to apply voltage and current to the material, in the same way it must be possible to measure the current and voltage that flows through it with a measurement range that includes nanometric magnitudes. For the measurement of resistivity in materials, there are mainly two methods, four- and two-point probe technique, each one with its respective advantages. Currently, it is possible to find equipment on the market that performs these tasks, however, its cost is too high, and they do not have multiplexing between the two methods. Therefore, the design and operation of the prototype of a low-cost solid-state material resistivity measurement system is presented, with subsequent visualization through the design and implementation of a graphical interface.

Resumen. La medición de la resistencia eléctrica de un material es muy importante al caracterizarlo, porque se puede entrever algunas de sus posibles aplicaciones tecnológicas. Para llevar a cabo estas mediciones es necesario disponer de alguna forma de aplicar voltaje y corriente al material, de igual manera se debe poder medir la corriente y el voltaje que fluye por el con un rango de medición que comprende magnitudes nano métricas. Para la medición de resistividad en materiales se tienen principalmente dos métodos, cuatro y dos puntas, cada uno con sus respectivas ventajas. En la actualidad es posible encontrar en el mercado equipos que realicen estas labores, sin embargo, su costo es demasiado elevado y no presentan multiplexación entre los dos métodos. Por lo tanto, se presenta el diseño y funcionamiento del prototipo de un sistema de medición de resistividad en materiales en estado sólido a bajo costo y con posterior visualización mediante el diseño e implementación de una interfaz gráfica.

Dosimetric characteristics of the main thermoluminescent glow peak of aquamarine

Características dosimétricas del principal pico de brillo termoluminiscente de la aguamarina

R Valdelamar Mena¹, R R Cogollo Pitalua¹, J I Herrera Cuitiva¹, and O D Gutiérrez Flores¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: omardariogutierrez@gmail.com

Abstract. The dosimetric response of the main thermoluminescent glow peak of aquamarine, cyan variety of beryl ($\text{Be}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_3)_6$), is reported. Samples were irradiated at room temperature using a $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$ β source at a dose rate of 0.10 Gys⁻¹. Measurements made at a heating rate of 1 °C/s after irradiation of 1 Gy to 100 Gy of β radiation show a main peak at 75 °C followed by three secondary peaks at 113°C, 188 °C and 306 °C respectively. The main peak dose response is linear within the first 10 Gy but tends to sublinearity as the dose extends up to 100 Gy of β radiation. The peak fades with the delay between irradiation and measurement to about 14% of its initial value 600 s after irradiation. Reproducibility analysis shows that the material reproduces its response under identical experimental conditions with an uncertainty of 0.8% after a beta dose irradiation of 10 Gy.

Resumen. La respuesta dosimétrica del principal pico de brillo termoluminiscente de la aguamarina, variedad cian de berilo ($\text{Be}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_3)_6$), es reportada. Las muestras fueron irradiadas a temperatura ambiente utilizando una fuente β de $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$ a una tasa de dosis de 0,10 Gys⁻¹. Las mediciones realizadas a una tasa de calentamiento de 1 °C/s tras la irradiación de 1 Gy a 100 Gy de radiación β muestran un pico principal a 75 °C seguido de tres picos secundarios a 113 °C, 188°C y 306 °C respectivamente. La respuesta con la dosis del pico principal es lineal dentro de los primeros 10 Gy, pero tiende a la sublinealidad a medida que la dosis se extiende hasta los 100 Gy de radiación β . El pico se desvanece con el retraso entre la irradiación y la medición alrededor del 14% de su valor inicial 600 s después de la irradiación. El análisis de reproducibilidad muestra que el material reproduce su respuesta en condiciones experimentales idénticas con una incertidumbre del 0,8% después de una irradiación de dosis beta de 10 Gy.

Effect of argon plasma treatment on the properties of biocomposites made with rattan and bamboo fibers

Efecto del tratamiento con plasma de argón sobre las propiedades de biocompuestos elaborados con fibras de ratán y bambú

M L Sánchez Cruz¹, L Y Morales¹, and G Capote Rodríguez²

¹ Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: gcapoter@unal.edu.co

Abstract. The use of plant fibers as reinforcement for polymeric composites requires the application of surface modification treatments. These treatments improve the adhesion of the fibers to the polymer, increase the material's strength, and reduce its absorption capacity. In this study, the effect of cold argon plasma treatment on the properties of biocomposites made from rattan and *bambusa vulgaris* fibers and a vegetable-based polyurethane from castor oil was analyzed. The compression molding method was used to manufacture the panels, applying constant pressure and controlled temperature to bond the constituent materials of the composite. To improve the mechanical strength and uniform distribution of loads in the panel, fibers of 30 cm in length were used, oriented along two orthogonal axes, forming [0/90]_s weaves. The results obtained show that by applying cold argon plasma treatment, the tensile strength, flexural strength, and toughness of the composite can be improved. Additionally, plasma treatment can enhance moisture resistance, which can expand its range of applications and improve its lifespan in humid environments.

Resumen. La utilización de fibras vegetales como refuerzo de compuestos poliméricos requiere de la aplicación de tratamientos de modificación superficial. Estos tratamientos mejoran la adherencia de las fibras al polímero, aumentan la resistencia del material y reducen su capacidad de absorción. En este trabajo, se analizó el efecto del tratamiento con plasma frío de argón en las propiedades de biocompuestos elaborados con fibras de ratán y *bambusa vulgaris*, y un poliuretano vegetal procedente del aceite de higuera. En el estudio, se empleó el método de moldeo por compresión para la fabricación de los paneles, aplicando una presión constante y temperatura controlada para unir los materiales constituyentes del compuesto. Para mejorar la resistencia mecánica y la distribución uniforme de las cargas en el panel, fueron utilizadas fibras de 30 cm de longitud orientadas a lo largo de dos ejes ortogonales, formando tejidos [0/90]_s. Los resultados obtenidos, permiten comprobar que al aplicar un tratamiento con plasma frío de argón se pueden mejorar la resistencia a la tracción, la resistencia a la flexión y la tenacidad del compuesto. Además, el tratamiento con plasma puede mejorar la resistencia a la humedad, lo que puede ampliar su rango de aplicaciones y mejorar su vida útil en ambientes húmedos.

Elaboration and characterization of bioplastics from mixtures of starch obtained from avocado seeds and silver nanoparticles

Elaboración y caracterización de bioplásticos a partir de mezclas de almidón obtenidos de semillas de aguacate y nanopartículas de plata

E F Carreño Florez¹, C A Meza-Barbosa¹, and G Peña Rodriguez¹

¹ Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

E-mail: gabrielpr@ufps.edu.co

Abstract. The purpose of this research is to obtain and characterize morphological, structural, chemical, thermal and mechanical bioplastics from hass avocado (*persea americana 'hass'*) seed starch in a matrix loaded with silver nanoparticles. The starches were extracted by the wet alkali method with sodium hydroxide at 0.2% w/w and treatment with sodium metabisulfite at 0.2% w/w and subsequent structural, morphological and physicochemical characterization. The silver nanoparticles were synthesized by electrochemical methods and characterized morphologically and chemically by transmission microscopy, and microanalysis by energy disperse X-ray spectroscopy. The extracted starch was used as an active polymeric source in amounts of variable formulation, carrying out previous tests to identify the mixing proportions in the formation of the semicrystalline solid, with water, acetic acid, glycerin, and silver particles mixing through the technique casting in plasticizer concentrations of 10 g to 30 g/100 g of starch at 80 °C for 10 min. Subsequently, the masses obtained were subjected to the process of physical modification and pelleting with a humidity setting of approximately 50%. The average starch extracted from Hass avocado seeds was 2895.03 g of dry powder at 35 °C, which represents a yield of 14.93%. A type B structure is evidenced with a crystallinity of 38.63% showing thermal and granular coupling in the polymeric structure. Starch extraction was successful, and its yield can be considered low, however, the environment and food safety can be benefited thanks to the intelligent transformation of this waste, which can be used in food and non-food systems.

Resumen. El propósito de esta investigación es obtener y caracterizar morfológica, estructural, química, térmica y mecánicamente bioplásticos a partir de almidón de semillas del aguacate hass (*persea americana 'hass'*) en una matriz cargada con nanopartículas de plata. Los almidones se extrajeron por el método de álcalis por vía húmeda con hidróxido de sodio al 0,2% p/p y tratamiento de metabisulfito de sodio al 0,2% p/p y posterior caracterización estructural, morfológica y fisicoquímica. Las nanopartículas de plata fueron sintetizadas por métodos electroquímicos y caracterizadas morfológica y químicamente por microscopia de trasmisión, y microanálisis por espectroscopia de energías dispersas de rayos X. El almidón extraído se usó como fuente polimérica activa en cantidades de formulación variable llevándose a cabo ensayos previos para identificar las proporciones de mezcla en la formación del sólido semicristalino, con agua, ácido acético, glicerina, y partículas de plata mezclándose a través de la técnica de fundición en concentraciones de plastificante de 10 g a 30 g/100 g de almidón a 80 °C durante 10 min. Posteriormente, las masas obtenidas se sometieron al proceso de modificación física y peletizado con un ajuste de humedad aproximadamente del 50%. El almidón extraído en promedio a partir de las semillas de aguacate hass fue de 2895,03 g de polvo seco a 35 °C lo que representa un rendimiento del 14,93%. Se evidencia una estructura tipo B con una cristalinidad del 38,63% mostrando acoplamiento térmico y granular en la estructura polimérica. La extracción de almidón fue exitosa y su rendimiento puede considerarse bajo, no obstante, el medio ambiente y la seguridad alimentaria pueden verse beneficiadas gracias a la transformación inteligente de este desecho el cual puede emplearse en sistemas alimentarios y no alimentarios.

Evaluation of the electrical and magnetic properties of the $\text{Bi}_{1-x}\text{Yb}_x\text{FeO}_3$

Evaluación de las propiedades eléctricas y magnéticas del sistema $\text{Bi}_{1-x}\text{Yb}_x\text{FeO}_3$

M S Castañeda Mendoza¹, I M Saavedra Gaona¹, C A Parra Vargas¹, I Supelano García¹,
L C I Fonseca Becerra¹, and S G Suarez Vera¹

¹ Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: sharon.suarez@uptc.edu.co

Abstract. The $\text{BiFe}_{1-x}\text{Yb}_x\text{O}_3$ ($x=0.00, 0.02, 0.04, 0.05, 0.06$, and 0.10) system was produced by the standard solid-state reaction method. The structural properties at room temperature were studied by Rietveld analysis of X-ray diffraction patterns, these reveal that samples crystallize in majoritarian $\text{BiFe}_{1-x}\text{Yb}_x\text{O}_3$ phase with trigonal R 3 m (#160) space group. Magnetic measurements as a function of temperature performed on vibrating magnetometer signals two magnetic behaviors, first one for $x<0.05$ and a second one for $x>0.06$. The resistivity measurements as a function of temperature exhibits insulating behavior. Polarization curves were collected at room temperature displaying a ferroelectric signature.

Resumen. El sistema $\text{BiFe}_{1-x}\text{Yb}_x\text{O}_3$ ($x=0,00, 0,02, 0,04, 0,05, 0,06$ y $0,10$) se produjo mediante el método estándar de reacción en estado sólido. Las propiedades estructurales a temperatura ambiente se estudiaron mediante análisis Rietveld de patrones de difracción de rayos X, estos revelan que las muestras cristalizan en fase mayoritaria $\text{BiFe}_{1-x}\text{Yb}_x\text{O}_3$ con grupo espacial trigonal R 3 m (#160). Las medidas magnéticas en función de la temperatura realizadas en un magnetómetro vibratorio señalan dos comportamientos magnéticos, el primero para $x<0,05$ y el segundo para $x>0,06$. Las mediciones de resistividad en función de la temperatura exhiben un comportamiento aislante. Las curvas de polarización se recogieron a temperatura ambiente mostrando una firma ferroeléctrica.

Evaluation of the structural, morphological, and optical properties of the CuO/WO₃ system

Evaluación de las propiedades estructurales, morfológicas y ópticas del sistema CuO/WO₃

M S Castañeda Mendoza¹, A M Raba Páez², M Rincón Joya³, E A Murillo Ruíz², and C A Parra Vargas¹

¹ Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

² Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

³ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: carlos.parra@uptc.edu.co

Abstract. The cupric oxide has been used as a p-type counterpart to tungsten trioxide (n-type) in various applications, such that the CuO/WO₃ system has shown better performance than individual cupric oxide and tungsten trioxide in gas sensor response for the detection of volatile organic compounds. On the other hand, the coexistence of copper and tungsten oxides in a heterostructure can improve the catalytic reduction capacity of this system. Considering these precedents, the CuO/WO₃ system was produced by a wet method, in order to establish the influence of synthesis parameters on its structural, morphological and optical properties. A first quantification of the crystalline phases present in the CuO/WO₃ system was carried out using the X-ray diffraction technique; 76% of cupric oxide and 24% of tungsten trioxide were the initially established percentages. The study of the morphological properties was carried out with transmission electron microscopy. The optical characterization was carried out with the diffuse reflectance spectroscopy technique. From these results, it was possible to establish the presence of two band gap energy values, 1.68 eV and 2.96 eV, values directly associated with the two oxides present in the system.

Resumen. El óxido cúprico se ha usado como contraparte de tipo p para el trióxido de wolframio (tipo n) en diversas aplicaciones, de tal manera que el sistema CuO/WO₃ ha mostrado mejor desempeño que el óxido cúprico y que el trióxido de wolframio individuales, en respuesta de sensor de gas para la detección de compuestos orgánicos volátiles. Por otro lado, la coexistencia de óxidos de cobre y wolframio en una heteroestructura puede mejorar la capacidad de reducción catalítica de este sistema. Considerando estos antecedentes, el sistema CuO/WO₃ fue producido por un método de vía húmeda, con el objeto de establecer la influencia de los parámetros de síntesis en sus propiedades estructurales, morfológicas y ópticas. Una primera cuantificación de las fases cristalinas presentes en el sistema CuO/WO₃ se realizó desde la técnica de difracción de rayos X; 76% de óxido cúprico y 24% de trióxido de wolframio fueron los porcentajes inicialmente establecidos. El estudio de las propiedades morfológicas se realizó con microscopía electrónica de transmisión. La caracterización óptica fue realizada con la técnica de espectroscopía de reflectancia difusa. Desde estos resultados fue posible establecer la presencia de dos valores de energía de banda gap; 1,68 eV y 2,96 eV, valores directamente asociados a los dos óxidos presentes en el sistema.

Kinetic analysis of the glow curve of α -Al₂O₃

Análisis cinético de la curva de incandescencia de α -Al₂O₃

R R Cogollo Pitalua¹, M D Castrillon Baron¹, Y C Espitia Paéz¹, and O D Gutiérrez Flores¹
¹ Universidad de Cordoba, Montería, Colombia

E-mail: omandariogutierrez@gmail.com

Abstract. In this work, the kinetic parameters of the main thermoluminescence peak of pure alumina (α -Al₂O₃) samples irradiated at different doses are reported. The thermoluminescence behavior is analyzed as a function of dose. The pellets were irradiated at different X- ray doses using a 6 MeV linear accelerator, in the air at room temperature, located at the Instituto Medico de Alta Tecnología in Monteria, Colombia. The thermoluminescence reading of the samples was performed on a Bicon® TLD 4500 system. The initial rise, peak shape, whole glow peak, and curve fitting methods were used to carry out a detailed kinetic analysis. The analysis of the thermoluminescence shows that the alumina arrays contain more than one type of trap due to several points of maximum luminous emission intensity in the thermoluminescence glow curve. The glow curves of the pure alumina samples exhibited a total of three glow peaks with the main peak located between 160 °C and 170 °C. The kinetic parameters (activation energy, frequency factor, and order parameter) of the main peak of the thermoluminescence glow curve are independent of the radiation dose received by the material. The dosimetric properties such as dose response and reproducibility are also reported.

Resumen. En este trabajo se presentan los parámetros cinéticos del pico principal de termoluminiscencia de muestras de alúmina pura (α -Al₂O₃) irradiadas a diferentes dosis. El comportamiento de la termoluminiscencia se analiza en función de la dosis. Las pastillas fueron irradiadas a diferentes dosis de rayos X utilizando un acelerador lineal de 6 MeV, en aire a temperatura ambiente, situado en el Instituto Médico de Alta Tecnología en Montería, Colombia. La lectura de termoluminiscencia de las muestras se realizó en un sistema Bicon® TLD 4500. Se utilizaron los métodos de elevación inicial, forma del pico, pico de brillo completo y ajuste de curvas para llevar a cabo un análisis cinético detallado. El análisis de termoluminiscencia muestra que las matrices de alúmina contienen más de un tipo de trampa debido a varios puntos de máxima intensidad de emisión luminosa en la curva de brillo de termoluminiscencia. Las curvas de brillo de las muestras de las muestras de alúmina pura mostraron un total de tres picos de incandescencia con el pico principal situado entre 160 °C y 170 °C. Los parámetros cinéticos (energía de activación, factor de frecuencia y parámetro de orden) del pico principal de la curva de incandescencia de termoluminiscencia son independientes de la dosis de radiación recibida por el material. También son reportadas las propiedades dosimétricas tales como la respuesta a la dosis y la reproducibilidad.

Mesoporous nanostructures PrCoO_3 doped Sr ($0.1 < x < 0.5$) nanostructures: synthesis, and structural and optical characterization

Nanoestructuras mesoporosas de Sr dopado con PrCoO_3 ($0.1 < x < 0.5$): síntesis y caracterización estructural y óptica

A Moreno¹, and C Aguilar^{2,3}

¹ Fundación Universitaria de Popayán, Popayán, Colombia

² Universidad del Valle, Cali, Colombia

³ Universidad del Cauca, Popayán, Colombia

E-mail: carola@unicauca.edu.co

Abstract. Mesoporous nanostructures of the $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ ($0.1 < x < 0.5$) system were synthesized via sol gel using Cetyltrimethylammonium bromide, as surfactant, and two different solvents, ethanol, and ethylene glycol. To determine the effect of the synthesis process on the characteristics of the nanostructures, these were characterized using Fourier-transform infrared and ultra-violet-visible diffuse reflectance spectroscopies, photoluminescence, X-ray diffraction, nitrogen adsorption-desorption isotherms and transmission electron microscopy. The $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ powders were found to have nanometric-sized monocrystalline primary particles (50 nm -100 nm) and their adsorption-desorption isotherms showed the type H1 hysteresis loops characteristic of mesoporous solids, a nature confirmed by the transmission electron microscopy micrographs. The obtained mesoporous $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ ($0.1 < x < 0.5$) nanostructures showed changes in their electric behavior. The electrical resistivity curves as a function of temperature showed a semiconductor behavior was present which depended on the Sr content.

Resumen. Se sintetizaron nanoestructuras mesoporosas del sistema $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ ($0.1 < x < 0.5$) vía sol gel utilizando bromuro de cetiltrimetilamonio, como surfactante, y dos solventes diferentes, etanol y etilenglicol. Para determinar el efecto del proceso de síntesis sobre las características de las nanoestructuras, estas se caracterizaron mediante espectroscopías de reflectancia difusa infrarroja por transformada de Fourier y ultravioleta-visible, fotoluminiscencia, difracción de rayos X, isoterma de adsorción-desorción de nitrógeno y microscopía electrónica de transmisión. Se encontró que los polvos de $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ tenían partículas primarias monocristalinas de tamaño nanométrico (50 nm - 100 nm) y sus isoterma de adsorción-desorción mostraban los bucles de histéresis tipo H1 característicos de los sólidos mesoporosos, una naturaleza confirmada por las micrografías microscopía electrónica de transmisión. Las nanoestructuras mesoporosas $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ ($0.1 < x < 0.5$) obtenidas mostraron cambios en su comportamiento eléctrico. Las curvas de resistividad eléctrica en función de la temperatura mostraron un comportamiento semiconductor que dependía del contenido de Sr.

Observation of granular Josephson mechanism and the vortex-glass transition in the polycrystalline superconductor $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

Observación del mecanismo granular de Josephson y de la transición vortex-glass en la muestra policristalina superconductora $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

E M Vargas-Pineda¹, L J Rivera Contreras¹, J Roa-Rojas¹, and D A Landinez Tellez¹
¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: dalandinezt@unal.edu.co

Abstract. The resistive transition between the normal and superconducting states in high critical temperature superconducting materials, is characterized by the occurrence of two well-defined stages: one transition called pairing transition and another one known as coherence transition. In the second one, the phase of the order parameter is the relevant quantity that varies between the grains of the system, leading to Josephson-type effects in the intergranular barriers due to the polycrystalline feature of this family of materials. The coherence transition for the sample $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ under the application of seven different electric transport currents was studied in this work. The sample was produced by the solid-state reaction and the resistive behavior was determined to perform the paraconductivity analysis and characterize granularity effects on the superconducting order parameter. A genuinely critical region characterized by dynamic critical exponent $z=4.50$ was identified, similar to the value reported for the transition vortex glass – fluid. This paper proposes to identify three-dimensional Gaussian fluctuations in the paracoherent region in order to get a coherence length associated with Josephson effects produced by the granular barrier and to find a factor related with the Josephson current in function of the seven applied currents.

Resumen. Durante el tránsito resistivo entre los estados normal y superconductor de superconductores de alta temperatura crítica, se ha observado la ocurrencia de una transición en dos etapas: una transición de apareamiento y otra de coherencia. Particularmente, la segunda se debe al carácter granular de estos materiales en donde la fase del parámetro de orden es la cantidad relevante que varía entre los granos de la muestra, dando lugar a efectos tipo Josephson en las barreras intergranulares debido a la característica policristalina de esta familia de materiales. En este trabajo se estudia la transición de coherencia para la muestra $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ bajo la aplicación de siete corrientes eléctricas de transporte diferentes. La muestra se fabricó mediante la reacción en estado sólido y con su comportamiento resistivo se realizó un análisis de paraconductividad con el fin de caracterizar los efectos de la granularidad sobre el parámetro de orden superconductor. Se identificó una región genuinamente crítica caracterizada por el exponente crítico dinámico $z=4,50$, similar al valor reportado para la transición vortex glass – fluid. Adicional, este trabajo propone identificar fluctuaciones gaussianas tridimensionales en la región paracoherente para obtener una longitud de coherencia asociada a los efectos Josephson producidos por la barrera granular y encontrar un factor relacionado con la corriente Josephson en función de las siete corrientes aplicadas.

Optical sensor based on lamellar double hydroxide for the detection of the polyphenol acid chlorogenic acid in coffee waste

Sensor óptico basado en doble hidróxido laminar para la detección del ácido polifenólico ácido clorogénico en residuos de café

E C Paris¹, J O Donizette Malafatti¹, A C Nascimento de Almeida², and L H Mattoso Capparelli¹

¹ Embrapa Instrumentação, São Carlos, Brazil

² Federal University of São Carlos, São Carlos, Brazil

E-mail: luiz.mattoso@embrapa.br

Abstract. The high presence of contaminants in the environment has raised awareness of the impact on ecosystem life. Different organic and inorganic molecules can potentially cause genomic mutations, occasioning disease and death. Among these possible pollutants are polyphenols, naturally found in plants and fruits, which in high amounts, may present significant toxicity. The chlorogenic acid is an example found in wastewater from agro-industrial processing such as coffee. In this sense, it is necessary to monitor these effluents to ensure the proper return to the environment with the least possible impact. Therefore, the investigation for optical sensors that detect these polyphenols in the field becomes attractive for their ease of use, real-time response, lower cost, and minimization of steps compared to traditional analytical techniques. In the present work, we sought to evaluate the use of lamellar double hydroxides modified with (3-Aminopropyl)triethoxysilane as a sensing platform for chlorogenic acid. The modification process in ethane solution under-refluxed for 24 hours in an oil bath. Concerning the detection of chlorogenic acid, a phosphate buffer suspension (pH 7) containing 2 mg of lamellar double hydroxides modified with (3-Aminopropyl)triethoxysilane was used. In the assay, the concentration of chlorogenic acid between 0.2 µg/mL – 2.0 µg/mL was evaluated. Also, the sensitivity and selectivity effect against caffeic acid and cinnamic acid was evaluated. The results were observed using fluorescence and ultraviolet-visible spectroscopy. In the results, it was possible to follow that in the presence of chlorogenic acid, the solution containing lamellar double hydroxides modified with (3-Aminopropyl)triethoxysilane changed from translucent to a yellowish coloration. Furthermore, it was possible to verify that by increasing the concentration of chlorogenic acid, there was more significant evidence of color change. Additionally, in front of cinnamic acid and caffeic acid, the lamellar double hydroxides modified with (3-Aminopropyl)triethoxysilane did not show visual optical changes. Thus, the present work made it possible to obtain a promising sensor that allows a quick response and easy understanding for detecting a polyphenol present in water used in agro-industrial treatment.

Resumen. La elevada presencia de contaminantes en el medio ambiente ha sensibilizado sobre su impacto en la vida de los ecosistemas. Diferentes moléculas orgánicas e inorgánicas pueden potencialmente causar mutaciones genómicas, ocasionando enfermedades y la muerte. Entre estos posibles contaminantes se encuentran los polifenoles, que se encuentran de forma natural en plantas y frutas y que, en cantidades elevadas, pueden presentar una toxicidad significativa. El ácido clorogénico (CCA) es un ejemplo que se encuentra en las aguas residuales de procesos agroindustriales como el café. En este sentido, es necesario monitorear estos efluentes para asegurar el retorno adecuado al medio ambiente con el menor impacto posible. Por lo tanto, la investigación de sensores ópticos que detecten estos polifenoles en campo se vuelve atractiva por su facilidad de uso, respuesta en tiempo real, menor costo y minimización de pasos en comparación con las técnicas analíticas tradicionales. En el presente trabajo, se buscó evaluar el uso de hidróxidos dobles laminares modificados con (3-Aminopropil)trietoxisilano como plataforma sensora de ácido clorogénico. El proceso de modificación en solución de etano se sometió a reflujo durante 24 horas en

un baño de aceite. Para la detección del ácido clorogénico se utilizó una suspensión de tampón fosfato (pH 7) que contenía 2 mg de hidróxidos dobles laminares modificados con (3-Aminopropil)trióxidosilano. En el ensayo, se evaluó la concentración de ácido clorogénico entre 0,2 µg/mL – 2,0 µg/mL. También se evaluó la sensibilidad y el efecto de selectividad frente al ácido cafeico y el ácido cinámico. Los resultados se observaron mediante espectroscopia de fluorescencia y ultravioleta-visible. En los resultados, fue posible seguir que en presencia de ácido clorogénico, la solución conteniendo hidróxidos dobles laminares modificados con (3-Aminopropil)trióxidosilano cambió de translúcida a una coloración amarillenta. Además, fue posible verificar que, al aumentar la concentración de ácido clorogénico, hubo una evidencia más significativa del cambio de color. Adicionalmente, frente al ácido cinámico y el ácido cafeico, los hidróxidos dobles laminares modificados con (3-Aminopropil)trióxidosilano no mostraron cambios ópticos visuales. Así, el presente trabajo posibilitó la obtención de un prometedor sensor que permite una rápida respuesta y fácil comprensión para la detección de un polifenol presente en el agua utilizada en el tratamiento agroindustrial.

Potential of dodecylamine-functionalized graphene oxide as a carbon dioxide capture material

Potencial del oxido de grafeno funcionalizado con dodecilamina como material de captura de dióxido de carbono

E M Pérez Rodríguez¹, G E Cepeda Marín¹, R Cabanzo Hernández¹, E Mejía Ospino¹, and V A Porras Galvis¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: vialpoga@gmail.com

Abstract. The energy sector is the largest polluter in the world (76%), followed by agriculture including livestock (12%) and the chemical industry (5.9%), which results in the release of large amounts of carbon dioxide into the atmosphere, generating global impacts such as: the generation of greenhouse gases, acidification of the oceans and changes in biodiversity, impacting the environment, the economy and society in general, this is why it is important to take measures to reduce carbon dioxide emissions and mitigate these impacts to ensure a sustainable future (Emissions by source: Which sectors generate the most emissions?, n.d.). In the last decade, multiple combinations of support and adsorbent materials have been used obtaining diverse results in carbon dioxide adsorption efficiency, as in a study conducted by Bouhadjar Boukoussa in 2019 where he uses mesoporous silica functionalized with triamine achieving an adsorption capacity of 3.2 mmol/g; another study by James C. Fisher in 2009 shows how beta zeolite functionalized with TEPA achieves an adsorption capacity of 2.9 mmol/g and finally, Yizhu Kuang in 2019 uses polyacrylonitrile fibers functionalized with TETA achieving an adsorption capacity of 5.44 mmol/g. On the other hand, carbon-based materials doped with nitrogen are the ones that have shown the best efficiency with respect to carbon dioxide adsorption, as shown in the study conducted by Jian-Cheng Geng in 2019 where he used porous carbons doped with nitrogen achieving an adsorption capacity of 6.9 mmol/g, which is why in this study we seek to evaluate a graphene oxide functionalized with dodecylamine. The graphene oxide is a monomolecular layer of graphite oxide, whose lamellar structure consists mainly of carbons with bonds that change hybridization from sp² to sp³ by the formation of covalent bonds with oxygen atoms coming from carbonyl, carboxyl, hydroxyl and epoxide functional groups, formed during the oxidation process of graphite (Dimiev & Tour, 2014) and is widely used due to its surface area, size, stability in aqueous solutions, resistance to thermal degradation and tensile strength; likewise, dodecylamine is a primary amine bonded to a long chain of twelve carbons, it is highly soluble in organic solvents of low polarity or totally apolar, with high thermal stability and great capacity of absorption of solids in suspension. In this work a synthesis route was carried out where graphene oxide was obtained by the modified Hummer's method and functionalized with dodecylamine by amidation and nucleophilic substitution reactions, for this an aqueous dispersion of graphene oxide was taken which was placed in a reflux assembly at 380 rpm and 60 °C; on the other hand, a solution of 1.5 g of dodecylamine in ethanol was prepared at room temperature with constant agitation. Once the temperature of the graphene oxide solution reached 60 °C, 10 ml of the dodecylamine solution was added every 10 minutes and the conditions were maintained for a reaction time of 24 hours. Then the obtained material was frozen and lyophilized in order to have the material in solid form for its later characterization. The material obtained was characterized by FT-IR spectroscopy which showed bands of the functional groups associated with graphene oxide and dodecylamine; to determine the particle size distribution and stability of the material in solution, the dynamic light scattering technique was used. Additionally, a thermogravimetric analysis was performed to show the physical and chemical properties of the material as a function of temperature and finally, adsorption isotherms were performed to establish the adsorption capacity of carbon dioxide; with the results obtained from this research it was possible to establish graphene oxide functionalized with dodecylamine as a material with a promising potential for the capture of carbon dioxide.

Resumen. El sector energético es el mayor contaminante en el mundo (76%), seguido por la agricultura incluyendo la ganadería (12%) y la industria de productos químicos (5,9%) esto se traduce en la liberación de grandes cantidades de dióxido de carbono a la atmósfera lo que genera impactos de carácter global como: la generación de gases de efecto invernadero, la acidificación de los océanos y cambios en la biodiversidad, impactando en el medio ambiente, la economía y la sociedad en general, por esto es importante tomar medidas para reducir las emisiones de dióxido de carbono y mitigar estos impactos para garantizar un futuro sostenible (emisiones por fuente: ¿Qué sectores generan más emisiones?, s. f.). En la última década se han utilizado múltiples combinaciones de materiales de soporte y absorbentes obteniendo diversos resultados en la eficiencia de adsorción de dióxido de carbono, como en un estudio realizado por Bouhadjar Boukoussa en el año 2019 donde utiliza sílice mesoporosa funcionalizada con triamina logrando una capacidad de adsorción de 3,2 mmol/g; otro estudio realizado por James C. Fisher en el año 2009 muestra como la zeolita beta funcionalizada con TEPA logra una capacidad de adsorción de 2,9 mmol/g y por último, Yizhu Kuang en el año 2019 utiliza fibras de poliacrilonitrilo funcionalizados con TETA logrando una capacidad de adsorción de 5,44 mmol/g. Por otro lado, los materiales con base carbón dopados con nitrógeno son los que mejor eficiencia han mostrado respecto a la adsorción de dióxido de carbono, como se muestra en el estudio realizado por Jian-Cheng Geng en el año 2019 donde utilizo carbones porosos dopados con nitrógeno logrando una capacidad de adsorción de 6.9 mmol/g, es por esto que en este estudio se busca evaluar un óxido de grafeno funcionalizado con dodecilamina. El óxido de grafeno es una capa monomolecular de óxido de grafito, cuya estructura laminar está conformada principalmente por carbonos con enlaces que cambian de hibridación de sp^2 a sp^3 por la formación de enlaces covalentes con átomos de oxígeno provenientes de grupos funcionales carbonilo, carboxilo, hidroxilo y epóxido, formados durante el proceso de oxidación del grafito (Dimiev & Tour, 2014) y es ampliamente usado debido a su área superficial, su tamaño, su estabilidad en soluciones acuosas, su resistencia a la degradación térmica y a la tracción; asimismo, la dodecilamina es una amina primaria unida a una larga cadena de doce carbonos, es altamente soluble en solventes orgánicos de baja polaridad o totalmente apolares, con alta estabilidad térmica y gran capacidad de absorción de sólidos en suspensión. En este trabajo se llevó a cabo una ruta de síntesis donde se obtuvo óxido de grafeno por el método Hummers modificado y se funcionalizó con dodecilamina mediante reacciones de amidación y sustitución nucleofílica, para esto se tomó una dispersión acuosa de óxido de grafeno la cual se situó en un montaje de reflujo a 380 rpm y 60 °C; por otra parte, se preparó una solución de 1,5 g de dodecilamina en etanol a temperatura ambiente con agitación constante. Una vez la temperatura de la solución de óxido de grafeno llegó a 60 °C se adicionó cada 10 minutos, 10 ml de la solución de dodecilamina y se mantuvieron las condiciones durante un tiempo de reacción de 24 horas. Luego el material obtenido se congeló y liofilizó con el fin de tener el material en forma sólida para su posterior caracterización. El material obtenido se caracterizó por espectroscopía FT-IR donde se mostraron bandas de los grupos funcionales asociados al óxido de grafeno y a la dodecilamina; para determinar la distribución del tamaño de partícula y estabilidad del material en solución se utilizó la técnica de dispersión dinámica de luz. Adicionalmente se realizó un análisis termogravimétrico que mostro las propiedades físicas y químicas del material en función de la temperatura y por último, se realizaron isoterma de adsorción para establecer la capacidad de adsorción de dióxido de carbono; con los resultados obtenidos se logró establecer el óxido de grafeno funcionalizado con dodecilamina como un material con un potencial prometedor para la captura de dióxido de carbono.

Preliminary study using Raman spectroscopy for identified microplastics ingested by zooplankton in Colombia caribbean region

Estudio preliminar usando espectroscopia raman para identificar microplásticos ingeridos por zooplancton en la región caribe de Colombia

L X Calderón Cascavita¹, R Cabanzo Hernández¹, L S Coral Chamorro¹, J A Ruiz Jimenez¹, L Caputo Cueto², M Benavides Serrato³, Q Rodríguez Pinilla³, and M I Criales Hernandez⁴

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Parque Nacional Natural Islas Corales del Rosario y San Bernardo, Cartagena de Indias, Colombia

³ Parque Nacional Natural Corales de Profundidad, Cartagena de Indias, Colombia

⁴ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: micrialesh@unal.edu.co

Abstract. Microplastics are small plastic fragments ranging in size from 1 μm to 5000 μm , originating from the chemical or physical degradation of larger plastic products or intentionally manufactured for incorporation into personal hygiene products, detergents, and so forth. These microplastics represent a growing threat to marine ecosystems, but their impact on marine protected areas remains poorly understood. This study highlights preliminary results obtained through the use of Raman spectroscopy, which allows the chemical identification of microplastics ingested by zooplankton. The sampling was carried out during the dry season of March 2022 in two important marine protected areas located in the Caribbean region of Colombia. These results contribute substantially to our understanding of microplastic dynamics in these invaluable marine protected environments.

Resumen. Los microplásticos son pequeños fragmentos con tamaño desde 1 μm hasta 5000 μm , procedentes de la degradación química o física de productos de mayor tamaño o fabricados intencionadamente para su incorporación a productos de higiene personal, detergentes, etc. Estos microplásticos representan una amenaza creciente para los ecosistemas marinos, pero su impacto en estas áreas marinas protegidas sigue siendo poco conocido. Este estudio destaca los resultados preliminares obtenidos mediante el uso de espectroscopia Raman, que permite la identificación química de microplásticos ingeridos por el zooplancton. El muestreo se realizó durante la estación seca de marzo de 2022 en dos áreas marinas protegidas ubicadas en la región Caribe de Colombia. Estos resultados contribuyen sustancialmente a nuestra comprensión de la dinámica de los microplásticos en los ambientes marinos protegidos.

Synthetic hydroxyapatite coatings doped with copper ions

Recubrimiento de hidroxiapatita sintética dopada por iones de cobre

L Bohórquez Santiago¹

¹ Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia

E-mail: lbohorquez@utp.edu.co

Abstract. The coating of metallic materials is a topic that has aroused great interest among researchers nowadays due to its high potential for medical applications. Hydroxyapatite is one of the most promising materials in this field due to its bioactive, biocompatible, and non-toxic properties, in addition to its chemical composition like human bone and its ability to chemically bond to bone, making it an ideal material for medical applications. However, hydroxyapatite has limitations as a raw material when it is used in areas subject to mechanical stress due to its fragility. To address this problem, materials such as titanium, steel, and alloys used in stressful situations can be coated. Hydroxyapatite coatings can improve the osteointegration of implants and reduce the body rejection rate. Currently, research is focused on improving the properties of hydroxyapatite by including chemical elements and synthesis techniques. Copper is one of the most attractive elements for coatings because it is an essential element in human metabolism, and it has been shown to have beneficial properties for bone health and angiogenesis, such as low cytotoxicity, antibacterial behavior, and biocompatibility. Copper ions can promote the proliferation of human endothelial cells and the differentiation of mesenchymal stem cells towards the osteogenic phenotype. Moreover, it has been shown that copper can inhibit the activity of osteoclasts and stimulate the aggregation of elastin fibers in mature fibers, promoting the deposition of the elastin matrix. The incorporation of copper ions into the hydroxyapatite matrix could improve the mechanical integrity and antibacterial capacity of coatings for biomedical applications. With this in mind, the developed work studied the effect of the incorporation of copper metal ions in hydroxyapatite coatings on silicon substrates by laser ablation technique and their respective characterization by X-ray diffraction, scanning electron microscopy, and Fourier-transform infrared spectroscopy. The X-ray diffraction was used to determine the crystalline phases and changes in the full width at half-maximum of hydroxyapatite coatings, resulting in HAp and HApCu coatings being crystalline and mainly composed of hydroxyapatite. The scanning electron microscopy images showed that the coatings are composed of micrometer and submicrometer-sized particles. Additionally, Energy-dispersive X-ray spectroscopy analysis was performed to visualize the chemical composition of the samples and monitor changes in calcium, phosphorus, and copper concentrations in the coatings. To study the vibrational states of hydroxyapatite coatings, Fourier-transform infrared spectroscopy characterization was performed, where the characteristic bands of functional groups present in HAp and HApCu coatings were observed. From the above, it was concluded that analyzing X-ray diffraction characterization, the incorporation of copper affects the size of hydroxyapatite crystals since the crystal size increases when copper is incorporated regardless of the number of copper threads used. Analyzing scanning electron microscopy, the deposition is given in a homogeneous way with micrometer-sized granules independently of the incorporation of copper.

Resumen. El recubrimiento de materiales metálicos es un tema que ha despertado gran interés en los investigadores de hoy en día debido su alto potencial para aplicaciones médicas. La hidroxiapatita es de los materiales más prometedores en este campo gracias a sus propiedades bioactivas, biocompatibles y no tóxicas, adicional a su composición química similar a la del hueso humano y su capacidad para unirse químicamente al hueso, lo que la hace un material idóneo para aplicaciones médicas. Sin embargo, la hidroxiapatita tiene limitaciones como material crudo cuando se utiliza en áreas sujetas a estrés mecánico debido a su fragilidad, como solución a esta problemática se pueden recubrir materiales como titanio, acero y aleaciones utilizados en situaciones estresantes. Los recubrimientos de hidroxiapatita pueden mejorar la osteointegración de los implantes y reducir la tasa de rechazo del cuerpo. Actualmente, se busca poder

mejorar las propiedades de la hidroxiapatita mediante la inclusión de elementos químicos y técnicas de síntesis. El cobre es uno de los elementos más atractivos para recubrimientos puesto que es un elemento esencial en el metabolismo humano y se ha demostrado que tiene propiedades beneficiosas para la salud ósea y la angiogénesis, tales como baja citotoxicidad, comportamiento antibacteriano y biocompatibilidad. Los iones de cobre pueden promover la proliferación de células endoteliales humanas y la diferenciación de células madre mesenquimales hacia el fenotipo osteogénico. Además, se ha demostrado que el cobre puede inhibir la actividad de los osteoclastos y estimular la agregación de fibras de elastina en fibras maduras, promoviendo la deposición de la matriz de elastina. La incorporación de iones de cobre en la matriz de hidroxiapatita podría mejorar la integridad mecánica y la capacidad antibacteriana de los recubrimientos para aplicaciones biomédicas, teniendo esto en cuenta, el trabajo desarrollado estudió el efecto de la incorporación de los iones metálicos de cobre en recubrimientos de hidroxiapatita sobre sustratos de silicio por la técnica de ablación laser y su respectiva caracterización por medio de difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido y espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier. La caracterización por difracción de rayos X se utilizó para determinar las fases cristalinas y los cambios en el ancho completo a la mitad del máximo de los recubrimientos de hidroxiapatita, obteniendo como resultado que los recubrimientos de HAp y HApCu son cristalinos y están compuestos principalmente de hidroxiapatita. En microscopía electrónica de barrido se obtuvieron imágenes que permitieron visualizar que los recubrimientos están compuestos de partículas de tamaño micrométrico y submicrométrico, adicional, se realizó un análisis de espectroscopía de dispersión de energía de rayos X para visualizar la composición química de las muestras y poder monitorear los cambios en las concentraciones de calcio, fósforo y cobre en los recubrimientos. Para estudiar los estados vibratorios de los recubrimientos de hidroxiapatita se realizó una caracterización por espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier, donde se pudo observar las bandas características de los grupos funcionales presentes en los recubrimientos de HAp y HApCu. A partir de lo anterior, se llegó a la conclusión de que analizando la caracterización por difracción de rayos X la incorporación de cobre afecta el tamaño de los cristales de hidroxiapatita, debido que al incorporarlo se puede ver que aumenta el tamaño del cristal independientemente del número de hilos de cobre que se hayan utilizado y analizando la microscopía electrónica de barrido la deposición se da de una forma homogénea con tamaños de orden micrométrico para los gránulos independientemente de la incorporación del cobre.

Use of mining tailings sludge as a percentage substitute for cement in the design of concrete mixture for the pilot construction of footprint plate in the municipality of Vetás, Santander, Colombia

Uso del lodo de relave minero como sustituto porcentual del cemento en el diseño de mezcla de concreto para la construcción piloto de placa huella en el municipio de Vetás, Santander, Colombia

M S Caycedo García¹, Y C López Bernier¹, H T Bueno Gómez¹, and J D Ardila Rey¹

¹ Universidad de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: jos.ardila@mail.udes.edu.co

Abstract. Mining tailings make up the sterile part of the rock that is discarded after a process of extraction and concentration (beneficiation) of a mineral in order to obtain elements of economic interest. At the end of this process, large amounts of tailings are generated, which can become environmental liabilities if they are not treated properly. In order to minimize their environmental impact and give them a use, a physical chemical study is undertaken as well as a design of mixtures for the percentual replacement of cement by the sludge of the mining tailings produced by the mining company La Elsy Ltda of the municipality of Vetás of the department of Santander. The sludge is used as a substitute of the cementing agent used to produce type D concrete for the construction of footprints and works of art such as pavements, gutters, sewers, separators, pavers, etc, without directly affecting the strength and original properties of the clinker, such as: densities, normal consistency and setting time. This project addresses responses to the need to continue with the production of green gold given that, in spite of having eliminated the use of heavy metals such as mercury and cyanide for the benefit of the gold as of seven years ago, La Elsy Ltda manifests the problem of the environmental liabilities generated by the accumulation of tailings as well as the need for technical studies that validate the use of this inert material in the construction of civil infrastructure, giving it a use that would boost the region and increase its inhabitants' quality of life. This research connects with the design of regeneration programs, which must integrate sustainability criteria and environmental best practices, aimed at minimizing potential negative impacts on the ecosystem structure and function of the moors as well as their derived ecosystem services. Likewise, this proposal harmonizes the fundamental rights to work and to a healthy environment, highlighting that they are not mutually exclusive, and that the conservation of the moor and the protection of the water resources are both compatible with the development of a mining activity focused on continuous improvement, the progressive implementation of environmental and social best practices and the strengthening of a governance for the conservation of the territory.

Resumen. Los relaves mineros conforman la parte estéril de la roca que es desechada después de un proceso de extracción y concentración (beneficio) de un mineral con el fin de obtener elementos de interés económico. Al final del proceso se generan grandes cantidades de relaves que al no ser tratados adecuadamente pueden convertirse en pasivos ambientales. Con el objeto de minimizar el impacto ambiental y darle un uso a los mismos, se realiza un estudio físico-químico y un diseño de mezclas para la sustitución porcentual de cemento por los lodos del relave minero producido por la empresa minera La Elsy Ltda del municipio de Vetás del departamento de Santander. Los lodos son utilizados como sustitución del agente cementante con la finalidad de producir concreto tipo D para la construcción de placa huella y obras de arte como andenes, cunetas, alcantarillas, separadores, adoquines etc, sin afectar directamente la resistencia y propiedades originales del clinker, tales como: densidades, consistencia normal y tiempo de fraguado. Este proyecto responde a la necesidad de continuar con la producción de oro verde, pues a pesar de implementar desde hace siete años la eliminación del uso de metales pesados como el mercurio y el cianuro para el

beneficio del oro, La Elsy Ltda manifiesta la problemática de los pasivos ambientales que genera la acumulación de los relaves mineros y la necesidad de realizar estudios técnicos que validen el uso de este material inerte en la construcción de infraestructura civil, dándole un uso que potencialice la región y aumente la calidad de vida de los habitantes. Esta investigación se conecta con el diseño de los programas de reconversión, que deben integrar criterios de sostenibilidad y buenas prácticas ambientales, orientados a minimizar la generación de impactos negativos en la estructura y función ecosistémica de los páramos y los servicios ecosistémicos derivados de estos. Igualmente, la propuesta armoniza los derechos fundamentales al trabajo y a un ambiente sano, resaltando que no son derechos excluyentes y que tanto la conservación del páramo como la protección del recurso hídrico son compatibles con el desarrollo de una actividad minera enfocada en el mejoramiento continuo, la implementación progresiva de mejores prácticas ambientales y sociales y el fortalecimiento de una gobernanza para la conservación del territorio.

Determination of the structural behavior of fiber-reinforced microconcrete plates for load-bearing wall systems

Determinación del comportamiento estructural de placas de microhormigón reforzado con fibras para sistemas de muros de carga

J D Palacios Pabon¹, and J Sanchez Molina¹

¹ Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

E-mail: jorgesm@ufps.edu.co

Abstract. Concrete is a compound of cement, water, aggregates, and additives that has excellent physical and mechanical properties. According to its composition, concrete can be classified as microconcrete when it is only made up of aggregates with particles smaller than 2.5 millimeters. On the other hand, natural fibers are reinforcing materials that have been used since ancient times, such as the use of horsehair and straw to reinforce mud bricks. When microconcrete is combined with fiber-reinforcement, a material with its own qualities is obtained for use in elements subjected to flexion and compression. The aim of this work is to determine the structural behavior of fiber-reinforced microconcrete plates with natural fibers of vegetable origin for load-bearing wall systems. Fibro-reinforced microconcrete mixes were developed, where different types of natural fibers were used, which underwent chemical treatment with sodium hydroxide and calcium hydroxide to remove lignin and thus reduce the alkaline reaction between the cement and the fibers, increasing the durability of the compound. Four microconcrete mixtures were made with fibers from fique, guadua, the stem of the banana palm and sugarcane bagasse. The results were compared with simple microconcrete and fibro-reinforced with fiberglass, the latter being the one that has presented the best properties in comparison with other types of artificial fibers. In conclusion, it was obtained that the mixtures reinforced with fique fibers present similar results to the mixture with fiberglass, while the samples with fibers of guadua, stem of the banana palm and sugarcane bagasse do not present a significant contribution to structural behavior. Therefore, for the construction of load-bearing walls, it was determined that the fiber-reinforced micro-concrete plates with fique fibers have an adequate structural behavior to flexo-compression, shear and, in addition, they present optimal rigidity for their use in the construction.

Resumen. El hormigón es un compuesto de cemento, agua, áridos y aditivos que tiene excelentes propiedades físicas y mecánicas; según la composición, el hormigón puede clasificarse como microhormigón cuando está formado únicamente por áridos con partículas menores a 2,5 milímetros. Por otro lado, las fibras naturales son materiales de refuerzo que se han utilizado desde la antigüedad, como el uso de crin y paja para reforzar los ladrillos de barro; cuando se combina el microhormigón con refuerzo de fibras se obtiene un material con cualidades adecuadas para usarlo en elementos sometidos a flexión y compresión. El objetivo de este trabajo es determinar el comportamiento estructural de placas de microhormigón reforzado con fibras naturales de origen vegetal. En este aspecto, se realizaron cuatro mezclas de microconcreto fibroreforzado con fibras naturales de fique, guadua, tallo de palma de plátano y bagazo de caña de azúcar; las fibras fueron sometidas a un tratamiento químico con hidróxido de sodio e hidróxido de calcio para eliminar la lignina y así reducir la reacción alcalina entre el cemento y las fibras, a fin de incrementar la durabilidad del compuesto. Los resultados se compararon con microhormigón simple y fibra de vidrio fibroreforzada, siendo esta última la que mejores propiedades presentó en comparación con otro tipo de fibras artificiales. En conclusión, se obtuvo que las mezclas reforzadas con fibras de fique presentan resultados similares a la mezcla con fibra de vidrio, mientras que las muestras con fibras de guadua, tallo de palma de plátano y bagazo de caña de azúcar no presentan un aporte significativo al comportamiento estructural. Por lo tanto, para la construcción de muros de carga, se determinó que las placas de microconcreto reforzado con fibras de fique tienen un comportamiento estructural adecuado a flexocompresión, y cortante y, además, presentan una rigidez óptima para su uso en la construcción.

Modeling, Simulation and Diagnostics (MSD)

Modelado, Simulación y Diagnóstico (MSD)

Computational fluid dynamics modelling and sensitivity study of the vapor absorption in a bubble double pipe absorber

Modelización de dinámica de fluidos computacional y estudio de sensibilidad de la absorción de vapor en un absorbedor de burbujas de doble tubo

C Amaris¹, and A Zapata²

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad del Valle, Cali, Colombia

E-mail: andres.zapata@correounivalle.edu.co

Abstract. Absorption heat pump technologies are called to play a relevant role in the energy transition given their nature of sustainable and environmentally friendly emerging options when driven by solar energy or waste energy. However, they require further development to compete with mechanical heat pump technologies. Absorption heat pumps, in their basic configuration, consist mainly of an evaporator, an expansion valve, a condenser, a generator, a solution pump, and an absorber. The absorber is identified as the most critical component because depending on how intense the vapor mass transfer is in this component, it affects the cooling capacity and performance of the system. Since the absorption process is exothermic, both mass and heat transfer occur simultaneously resulting in a complex phenomenon. Moreover, the bubble absorption mode allows better exchange interphase in comparison to falling film or adiabatic absorption mode configurations. The present investigation aims to model the bubble absorption process performance in an aluminium double pipe absorber of 1-meter length using a mixture of ammonia/lithium nitrate. The ammonia/lithium nitrate mixture is identified as a promising alternative to conventional working fluids and has a great potential for solar air-conditioning applications. The computational fluid dynamics model test section consists of a vertical aluminium double pipe absorber with smooth surfaces where the mixture and ammonia vapor flow upward in the inner tube while the cooling water flows downward in the annulus side. In this study, the methodology followed to built-up a computational fluid dynamics model of the absorption process is presented and validated. Moreover, a sensitivity study is also presented considering the effect of the operating parameters on absorber performance indicators such as absorption mass flux, mass transfer coefficient, and solution heat transfer coefficient. Results mainly indicate that the computational fluid dynamics model adequately simulates the effect of the cooling water flow and solution mass flow. Results also show that the heat and mass transfer parameters improve as the solution mass flow is risen and the cooling water temperature is reduced. The developed computational fluid dynamics model helps to avoid costly experimentation and will be used to design bubble absorbers where the vapor absorption process can be enhanced using internal pipes with inner advanced surfaces of different material characteristics.

Resumen. Las tecnologías de bombas de calor de absorción están llamadas a desempeñar un papel relevante en la transición energética dada su naturaleza al representar una opción emergente sostenible y respetuosas con el medio ambiente especialmente cuando son alimentadas con energía solar o energía residual. Sin embargo, estas tecnologías requieren un mayor desarrollo para competir con las tecnologías de bombas de calor por compresión mecánica. Las bombas de calor de absorción, en su configuración básica, consisten principalmente en un evaporador, una válvula de expansión, un condensador, un generador, una bomba de flujo y un absorbedor. El absorbedor se identifica como el componente más crítico porque, dependiendo de la intensidad de la transferencia de masa de vapor en este componente, este afecta la capacidad de enfriamiento y el rendimiento del sistema. Dado que el proceso de absorción es exotérmico, tanto la transferencia de masa como la de calor ocurren simultáneamente lo que resulta en un fenómeno complejo. Además, el modo de absorción de burbujas permite una mejor interfase de intercambio en comparación con

las configuraciones de película descendente o modo de absorción adiabático. La presente investigación tiene como objetivo modelar el rendimiento del proceso de absorción de burbujas en un absorbedor de doble tubo de aluminio de 1 metro de longitud utilizando la mezcla amoníaco/nitrato de litio. La mezcla de amoníaco/nitrato de litio ha sido identificada como una alternativa prometedora de los fluidos de trabajo convencionales y tiene un gran potencial para aplicaciones de aire acondicionado solar. El modelo de dinámica de fluidos computacional consiste en un absorbedor vertical de aluminio de doble tubo con superficies lisas donde la mezcla y el vapor de amoníaco fluyen hacia arriba en el tubo interior mientras que el agua de enfriamiento fluye hacia abajo en el lado anular. En este estudio, se presenta la metodología seguida para construir un modelo de dinámica de fluidos computacional para el modelamiento del proceso de absorción utilizando la mezcla amoníaco/nitrato de litio. Además, también se presenta un estudio de sensibilidad considerando el efecto de los parámetros de operación en los indicadores de rendimiento del absorbedor, tales como el flujo de masa de absorción, el coeficiente de transferencia de masa y el coeficiente de transferencia de calor de la solución. Los resultados indican que el modelo de dinámica de fluidos computacional simula adecuadamente el efecto del flujo de agua de enfriamiento y el flujo másico de la solución. Los resultados también muestran que los parámetros de transferencia de calor y masa mejoran a medida que aumenta el flujo másico de la solución y se reduce la temperatura del agua de enfriamiento. El modelo de dinámica de fluidos computacional desarrollado evita costosas experimentaciones y facilitará el diseño de absorbedores de burbujas donde el proceso de absorción de vapor se puede mejorar utilizando tubos internos con superficies avanzadas internas de diferentes materiales.

Characterization of mechanical properties of porcine bone using finite element models and experimental tests

Evaluación de las propiedades mecánicas del hueso porcino mediante análisis de elementos finitos y ensayos experimentales

C A Hernández Salazar¹, D F Villegas Bermudez¹, and O A González-Estrada¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: agonzale@uis.edu.co

Abstract. Finite element models have facilitated significant advances in the field of bioengineering, and are used to describe and characterize tissues, study the effect of forces on different parts of the body, and design materials to be used in prostheses. The study with pigs has allowed us to advance in the field of medicine, as pig tissues have a similarity to humans, allowing for better model results. In this work, experimental data obtained from compression tests of porcine femurs are analyzed and compared with numerical models developed through finite element analysis. Additionally, experimental tests were conducted in the laboratory, performing axial compression tests on porcine femurs to obtain mechanical properties and determine load conditions, stresses, and strains in the elastic range. On the other hand, the leg bones of pigs obtained through standard computed tomography scans were segmented. Subsequently, finite element segmentation was analyzed, and bone properties were assigned to voxels considering Hounsfield units for the porcine femur. In each voxel, an isotropic model was considered for trabecular or cortical tissue according to the material. Evaluation through the finite element model allows us to determine the failure zone of each geometry, as well as stress distribution. Finally, experimental data is compared with that obtained through finite element analysis. A good correlation was shown in the displacements of the three sections of the porcine femur analyzed. Specifically, a difference of only 0.3% was observed in cortical tissues, while differences of 2% and 1% were observed in trabecular-cortical and trabecular tissues, respectively. The proposed work includes the representation of the functionally graded behavior of bone, which will help to obtain more accurate medical results, contributing to medicine.

Resumen. Los modelos de elementos finitos han facilitado grandes avances en el área de la bioingeniería, y se utilizan para describir y caracterizar tejidos, estudiar el efecto de las fuerzas en diferentes partes del cuerpo, diseñar materiales a usar en prótesis. El estudio con el cerdo nos ha permitido avanzar en el campo de la medicina, debido a que los tejidos del cerdo tienen una semejanza con el humano, permitiendo obtener modelos con mejores resultados. En este trabajo se analizan y comparan los datos experimentales obtenidos en las pruebas de compresión del fémur porcino, con modelos numéricos desarrollados mediante análisis por elementos finitos. Además, se hicieron pruebas experimentales en el laboratorio, realizando ensayos de compresión con carga axial en el fémur porcino para obtener las propiedades mecánicas y determinar las condiciones de carga, esfuerzos y deformaciones en el rango elástico. Por otro lado, se segmentaron los huesos de la pierna de cerdo obtenidas por tomografías computarizadas estándar. Posteriormente, se analizó la segmentación por elementos finitos y se asignaron las propiedades del hueso en voxeles teniendo en cuenta las unidades Hounsfield para el fémur de cerdo. En cada vóxel, se consideró un modelo isótropo para tejido trabecular o cortical de acuerdo con el material. La evaluación a través del modelo de elementos finitos nos permite determinar la zona de fallo de cada geometría, así como la distribución de tensiones. Finalmente, los datos experimentales son comparados con los obtenidos en el análisis por elementos finitos. Se mostró una buena correlación en los desplazamientos de las tres secciones del fémur porcino analizadas. Específicamente, se observó una diferencia de tan solo el 0,3% en los tejidos corticales, mientras que en los tejidos trabeculares-corticales y trabeculares se observaron diferencias del 2% y del 1%, respectivamente. El trabajo propuesto incluye la representación del comportamiento funcionalmente graduado del hueso, lo cual ayudará a obtener resultados médicos más preciso, brindando un aporte a la medicina.

Comparative axial compression testing of porcine vertebrae by laboratory testing and finite element analysis

Ensayo comparativo de compresión axial en vértebras porcinas mediante pruebas de laboratorio y análisis de elementos finitos

C A Hernández Salazar¹, C E Chamorro García¹, and O A González- Estrada¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramaga, Colombia

E-mail: agonzale@uis.edu.co

Abstract. The study of pig bones, due to their similarity with human tissues, has allowed for the development, updating, and selection of technological tools that aid in the improvement of diagnosing diseases and injuries that may affect the skeletal system. Radiomic techniques involving diagnostic medical image segmentation, along with finite element analysis, enable the detailed study of bone damage, loss of density, and mechanical functionality, which is a significant advancement in personalized medicine. In this study, laboratory tests are conducted on axial loads to L3-L6 pig vertebrae, their mechanical properties are characterized, and the maximum loads that they can withstand in the elastic zone are determined. Furthermore, 3D models are generated through the segmentation of computed tomography images of the vertebrae. A digital shadow of the vertebra is constructed by assigning an anisotropic material model to the reconstructed geometry. Subsequently, finite element analysis is performed to determine the elastic characteristics, strength, and displacement. Once the information is obtained, it is compared between the experimental data and the numerical model, showing a good correlation, with a difference of less than 0.8% in Young's modulus and 1.53% in displacement. The proposed methodology will aid in obtaining more precise medical results, using models that will serve as a reference for diagnosis.

Resumen. El estudio de los huesos porcinos, por su similitud con los tejidos en el ser humano, ha permitido obtener, actualizar y seleccionar herramientas tecnológicas que ayudan a mejorar el diagnóstico de enfermedades y lesiones que pueden afectar el sistema óseo. Las técnicas radiómicas que involucran la segmentación de imágenes médicas diagnósticas, junto con análisis de elementos finitos, permiten el estudio detallado de las afectaciones en los huesos, incluyendo deterioro, pérdida de densidad y de funcionalidad mecánica, siendo un avance importante dentro del ámbito de la medicina personalizada. En este trabajo se realizan ensayos de laboratorio con cargas axiales a las vértebras L3-L6 de porcino, se caracterizan las propiedades mecánicas y determinan las cargas máximas que pueden soportar en la zona elástica. Por otro lado, con la segmentación de la tomografía axial computarizada de las vértebras se genera un modelo 3D. Además, se construye una sombra digital de la vértebra asignando un modelo de material anisótropo a la geometría reconstruida. Posteriormente, se realiza el análisis de elementos finitos para determinar las características elásticas, su resistencia y su desplazamiento. Una vez obtenida la información, se compara entre los datos experimentales y el modelo numérico, mostrando una buena correlación, con una diferencia inferior al 0,8% en el módulo de Young, y 1,53% en el desplazamiento. La metodología planteada ayudará a la obtención de resultados médicos con mayor precisión, empleando modelos que servirán como referencia para el diagnóstico.

Critical temperature and hysteresis loops of an ising-type ferromagnetic system of spins 1 and 2: a Monte Carlo study

Temperatura crítica y lazos de histéresis de un sistema ferromagnético tipo ising de espines 1 y 2: un estudio Monte Carlo

N De La Espriella Vélez¹, J C Madera², and L A Alcalá Varilla¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

² Universidad del Sinú, Montería, Colombia

E-mail: lalcala@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. In the present work, the thermomagnetic properties of a ferromagnetic system of integer magnetic moments $S=\pm 2, \pm 1, 0$ and $Q=\pm 1, 0$ were analyzed by means of Monte Carlo simulation techniques and a thermal bath algorithm. The ferromagnet was configured through a two-dimensional square lattice, considering nearest-neighbors exchange couplings between S and Q spins ($S_i \rightarrow Q_j$), next-nearest-neighbors exchange couplings between S-type spins ($S_i \rightarrow S_j$), and interactions with an external magnetic field. The effects of the next-nearest-neighbor exchange parameter and a magnetic field h on the phase diagrams at finite temperature of the magnetizations, the magnetic susceptibility, and the critical temperature were analyzed, as well as the hysteresis behavior for different temperature values. The critical temperature is proportional to the interactions with an external magnetic field and the next-nearest-neighbor exchange parameter.

Resumen. En el presente trabajo se analizaron, mediante técnicas de simulación Monte Carlo y un algoritmo tipo baño térmico, las propiedades termomagnéticas de un sistema ferromagnético de momentos magnéticos enteros $S=\pm 2, \pm 1, 0$ y $Q=\pm 1, 0$. El ferromagneto se configuró a través de una red bidimensional cuadrada, considerando acoplamientos de intercambio a primeros vecinos S y Q ($S_i \rightarrow Q_j$), a segundos vecinos tipo S ($S_i \rightarrow S_j$) e interacciones con un campo magnético externo. Se analizaron los efectos del parámetro de intercambio a segundos vecinos y un campo magnético sobre los diagramas de fase a temperatura finita de las magnetizaciones, la susceptibilidad magnética y la temperatura crítica; así como también el comportamiento de histéresis para diversos valores de temperatura. La temperatura crítica es proporcional a las interacciones con el campo magnético externo y al parámetro de intercambio a segundos vecinos.

Effects of exchange and anisotropy interactions on the compensation and hysteresis behaviors of a ferrimagnet of (7/2 and 2)-spins

Efectos de interacciones de intercambio y anisotropía sobre el comportamiento de compensación e histéresis de un ferrimagneto de espines 7/2 y 2

N De La Espriella Vélez¹, J C Madera², and L C Sánchez¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

² Universidad del Sinú, Montería, Colombia

E-mail: lsanchezpacheco@gmail.com

Abstract. By means of Monte Carlo simulations, the thermomagnetic properties of a ferrimagnetic system with spins of values $Q=7/2$ and $S=3/2$ alternating on a square lattice are investigated. The Hamiltonian of interactions of the model contains antiferromagnetic and ferromagnetic next-nearest-neighbor couplings, as well as magnetocrystalline anisotropy in each of the sublattices composing the ferrimagnet. The effects of such interactions are reflected in the compensation, multiple hysteresis loops, and discontinuities phenomena in the magnetization phase diagrams. The positive increase of the exchange interaction generates discontinuous transitions in the system and destroys the spin compensation points. Finally, phase diagrams of the critical, spin compensation, and discontinuous temperatures as a function of exchange and anisotropic couplings are presented in the (J_3, T) (D_3, T) planes.

Resumen. Mediante simulaciones Monte Carlo, se investigan las propiedades termomagnéticas de un sistema ferrimagnético con espines de valores $Q=7/2$ y $S=2$, alternados sobre una red cuadrada. El Hamiltoniano de interacciones del modelo contiene acoplamientos antiferromagnéticos y ferromagnéticos a segundos vecinos, así como también anisotropía magnetocristalina en cada una de las subredes que componen el ferrimagneto. Los efectos de dichas interacciones se reflejan en los fenómenos de compensación doble y simple, al igual que los múltiples lazos de histéresis y discontinuidades en los diagramas de fase de la magnetización. El incremento positivo de la interacción de intercambio genera transiciones discontinuas en el sistema y destruye los puntos de compensación de espín. Por último, se presentan diagramas de fases de las temperaturas crítica, de compensación de espín y discontinua en función de los acoplamientos de intercambio y anisotrópico, en los planos (J_3, T) (D_3, T) .

First-principles calculations of the structural and electronic properties of GaAs/InAs interfaces

Cálculos de primeros principios de las propiedades estructurales y electrónicas de las interfaces GaAs/InAs

I Arellano¹, A Gil-Rebaza², S Amaya-Roncancio³, and E Restrepo Parra⁴

¹ Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia

² Universidad Nacional de La Plata, Buenos Aires, Argentina

³ Universidad de la Costa, Barranquilla, Colombia

⁴ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: erestrepopa@unal.edu.co

Abstract. The interfaces are formed when two different semiconductors are brought into contact with each other. The importance of GaAs/InAs interfaces are related with the fact that they exhibit unique structure and electronic properties that can be used to design and fabricate novel electronic and optoelectronic devices. In this study, we present the structural, electronic, and energetic properties of (GaAs)_m/(InAs)_n (m, n=1 to n=3) interfaces using ab-initio calculations within the density functional theory. The electron-ion interaction is described with an ultrasoft scalar relativistic pseudopotential. Within the generalized gradient approximation, the Perdew-Burke-Ernzerhof exchange-correlation functional is used. The kinetic cutoff energy is set at 70 Ry and the cutoff for the augmented density is set at 700 Ry after convergence calculations. All the structures are energy minimized to find the optimal lattice constant and optimal height (m, n). Subsequently, a geometric relaxation of all atomic positions and lattice parameters is performed to ensure the energy minimization. Cohesive and formation energies are calculated to understand energetic stability. Moreover, density of states and band structure calculations are presented to understand the electronic behavior of the studied interfaces.

Resumen. Las interfaces se forman cuando dos semiconductores diferentes se ponen en contacto entre sí. La importancia de las interfaces de GaAs/InAs está relacionada con el hecho de que exhiben una estructura y propiedades electrónicas únicas que pueden usarse para diseñar y fabricar nuevos dispositivos electrónicos y optoelectrónicos. En este estudio, presentamos las propiedades estructurales, electrónicas y energéticas de las interfaces (GaAs)_m/(InAs)_n (m, n=1 a n=3) utilizando cálculos ab-initio dentro de la teoría del funcional de la densidad. La interacción electrón-ion se describe con un pseudopotencial relativista escalar ultrasuave. Dentro de la aproximación de gradiente generalizado, se utiliza la función de correlación de intercambio Perdew-Burke-Ernzerhof. La energía de corte cinético se establece en 70 Ry y el corte para la densidad aumentada se establece en 700 Ry después de cálculos de convergencia. Se minimiza la energía de todas las estructuras para encontrar la constante de red óptima y la altura óptima (m, n). Posteriormente, se realiza una relajación geométrica de todas las posiciones atómicas y parámetros de la red para asegurar la minimización de la energía. Las energías de cohesión y de formación se calculan para entender la estabilidad energética. Además, se presentan cálculos de densidad de estados y estructura de bandas para comprender el comportamiento electrónico de las interfaces estudiadas.

Influence of surface defects on the vortex penetration and arrangement at mesoscopic superconducting samples

Influencia de los defectos superficiales en la penetración y disposición del vórtice en muestras superconductoras mesoscópicas

A Presotto¹, J J Barba Ortega², and R Zadorosny¹

¹ Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira, Brazil

² Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: rafael.zadorosny@unesp.br

Abstract. All superconductor's applications lie on carry dissipationless current. However, in the presence of external magnetic fields, including the self-field, vortices penetrate the sample, and their dissipative motion generates resistive states. Thus, once the superconductive state survives for higher magnetic fields due to the presence of vortices, those specimens cannot move to increase the critical current density. Then, in this work, we studied the influence of surface defects on the vortex penetration and arrangement at square mesoscopic superconducting materials using the time-dependent Ginzburg-Landau theory. The lateral size of the samples was $L=10\xi(0)$, with five defects on one of the borders. Besides the defects' width being set as $0.250\xi(0)$, their positions and lengths varied. We also used a homogeneous system (pristine) to compare the results. Thus, we studied the dynamics of vortex penetrations, focusing mainly on the penetrations that occurred in the region with the defects. The main result we obtained is that, due to the confinement effects present in mesoscopic superconductors, the presence of defects in one of the samples' edges is not a necessary condition for the vortices to penetrate this region.

Resumen. Todas las aplicaciones de los superconductores se basan en llevar corriente sin disipación. Sin embargo, en presencia de campos magnéticos externos, incluido el campo propio, los vórtices penetran en la muestra y su movimiento disipativo genera estados resistivos. Por lo tanto, una vez que el estado superconductor sobrevive para campos magnéticos más altos debido a la presencia de vórtices, esos especímenes no pueden moverse para aumentar la densidad de corriente crítica. Luego, en este trabajo, estudiamos la influencia de los defectos superficiales en la penetración y disposición del vórtice en materiales superconductores mesoscópicos cuadrados utilizando la teoría Ginzburg-Landau dependiente del tiempo. El tamaño lateral de las muestras fue $L=10\xi(0)$, con cinco defectos en uno de los bordes. Además de que el ancho de los defectos se estableció en $0.250\xi(0)$, sus posiciones y longitudes variaron. También utilizamos un sistema homogéneo (prístino) para comparar los resultados. Por lo tanto, estudiamos la dinámica de las penetraciones de vórtices, enfocándonos principalmente en las penetraciones que ocurrieron en la región con los defectos. El principal resultado que obtuvimos es que, debido a los efectos de confinamiento presentes en los superconductores mesoscópicos, la presencia de defectos en uno de los bordes de las muestras no es una condición necesaria para que los vórtices penetren en esta región.

Molecular dynamics study of oil/water separation by graphene oxide and alkylamine-modified graphene oxide membranes

Estudio de dinámica molecular de la separación aceite/agua mediante membranas de óxido de grafeno y óxido de grafeno modificado con alquilamina

E Mejía Ospino¹, C Forero¹, and L Muñoz³

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: leomunozr84@gmail.com

Abstract. Studies have shown that the use of alkylated graphene oxide in filtration columns results in superior demulsification efficacy compared to graphene oxide, indicating its potential for improving the oil-in-water separation process. Molecular dynamics can be employed to explore the mechanism underlying the superior behavior of alkylated graphene oxide membranes in oil/water separation. In this work, molecular dynamics simulations were employed to investigate the toluene/water separation process of graphene oxide and alkylated graphene oxide membranes under a gravity field. The variations in the interlayer spacing, offset, and gap of the membrane models were investigated. Moreover, the effect of the alkyl chain length on the structure of alkylated graphene oxide nanosheets was studied. Results indicate that increasing the gap and interlayer spacing of the membrane models decreases the filtration efficiency. However, the offset values did not show a significant effect on the filtration efficiency. The interaction potential energy profiles were calculated and it was found that the membranes strongly interact with toluene. As water molecules pass through the membrane, the interaction energy between the membranes and water increases, indicating effective separation of the oil and water phases. The lower interaction energy between alkylated graphene oxide and toluene, compared to that of graphene oxide and toluene, indicates that alkylated graphene oxide efficiently retains toluene molecules. The radial distribution functions of sp² carbons and alkyl carbons in the alkylated graphene oxide membrane systems were calculated to investigate their interaction with toluene. The results indicate that toluene interacts strongly with sp² carbons in the membrane.

Resumen. Diversos estudios han demostrado que el uso de óxido de grafeno alquilado en columnas de filtración produce una eficacia de desemulsificación superior a la del óxido de grafeno, lo que indica su potencial para mejorar el proceso de separación de aceite en agua. La dinámica molecular puede emplearse para explorar el mecanismo subyacente al comportamiento superior de las membranas de óxido de grafeno alquilado en la separación de aceite/agua. En este trabajo, se emplearon simulaciones de dinámica molecular para investigar el proceso de separación tolueno/agua de las membranas óxido de grafeno y óxido de grafeno alquilado bajo un campo gravitatorio. Se investigaron las variaciones en el espaciado entre capas, el desfase y la abertura de los modelos de membrana. Además, se estudió el efecto de la longitud de la cadena alquímica sobre la estructura de las nanohojas de óxido de grafeno alquilado. Los resultados indican que el aumento de la abertura y del espaciado entre capas de los modelos de membrana disminuye la eficacia de filtración. Sin embargo, los valores de desfase no mostraron un efecto significativo sobre la eficiencia de filtración. Se calcularon los perfiles de energía potencial de interacción y se comprobó que las membranas interaccionan fuertemente con el tolueno. A medida que las moléculas de agua atraviesan la membrana, la energía de interacción entre las membranas y el agua aumenta, lo que indica una separación eficaz de las fases de aceite y agua. La menor energía de interacción entre el óxido de grafeno alquilado y el tolueno, comparada con la del óxido de grafeno y el tolueno, indica que el óxido de grafeno alquilado retiene eficazmente las moléculas de tolueno. Se calcularon las funciones de distribución radial de los carbonos sp² y los carbonos alquilo en los sistemas de membrana óxido de grafeno alquilado para investigar su interacción con el tolueno. Los resultados indican que el tolueno interactúa fuertemente con los carbonos sp² de la membrana.

Mutual information for prediction of relevant parameters in the perovskite solar cell synthesis

Predicción de parámetros relevantes de síntesis en celdas solares de perovskitas mediante medidas de información mutua

M A Botero Londoño¹, J E Vélez Sánchez¹, and F A Sepúlveda Sepúlveda¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: alexander.sepulveda@saber.uis.edu.co

Abstract. Learning about those most relevant descriptors describing the synthesis of Perovskite solar cells could have a significant impact on improving their efficiency. Having this information could reduce time and resources during the synthesis procedure because it would permit to material scientists to focus on those most influential variables. Machine learning techniques can be used for this purpose. In particular, there are two approaches: a) using feature subset selection techniques and, b) using statistical association measures. In the first case, the selected variables and the relevance measure they provide depends on the kind of machine learning model used. That is, the result depends on the type and complexity of the selected model among those possibilities offered by the machine learning field. By contrast, statistical association measures provide a single result because they do not incorporate the use of particular models in their procedures, thus, their results are independent of the model. Among statistical association measures, Pearson correlation coefficient and rank correlation measures such as Kendall's and Spearman's coefficients can be mentioned. Regarding Pearson, it is assumed that the relationship between the involved random variables is linear, which is rare, taking into account the complexity of this kind of phenomena. On the other hand, rank correlation measures work for nonlinear relationships, but only if the underlying function of the phenomenon is monotonic increasing or decreasing. By contrast, the mutual information measure does not suffer from these drawbacks. In present work, we propose to use mutual information measure in order to quantify the amount of information contained in descriptor variables about synthesis process, in respect to perovskite solar cells performance parameters. The performance measures correspond to open-circuit voltage, short circuit current density, fill factor, and power conversion efficiency. The mutual information measure (which quantifies the information that a descriptor contributes to the inference of performance parameter) is estimated by using a data set composed of more than 40000 experimental observations about perovskite cells. In present work, we propose to use mutual information measure in order to quantify the amount of information contained in descriptor variables about synthesis, in respect to Perovskite solar cells performance parameters. As a result, it was found that those variables that could contribute the most to power conversion efficiency prediction are: i) concentrations of elements used to form the perovskite thin film; ii) the materials used to form the back contact and the hole transport layer; and iii) Perovskite's thickness. Each of these variables provides between 1.2 bits and 1.8 bits of information. Taking into account that the amount of information corresponding to power conversion efficiency resulted in 4.33 bits, it can be inferred that the effect of these variables is considerable.

Resumen. Saber cuáles son aquellas variables de mayor relevancia durante el proceso de síntesis de celdas solares de perovskita podría tener un impacto significativo en la mejora de eficiencia de las mismas. Con esta información se puede ahorrar tiempo y recursos durante la síntesis al permitir que el científico de materiales pueda actuar sobre aquellas variables que más influyen en los parámetros de desempeño. Para ello se pueden utilizar técnicas de machine learning. En particular se tienen dos enfoques: a) utilizando técnicas de selección de subconjuntos de características y b) usando medidas de asociación estadística. En el primer caso, las variables seleccionadas y la medida de relevancia que estas entregan dependen del tipo de modelo machine learning utilizado. Es decir, el resultado es dependiente del tipo y complejidad del modelo dentro del abanico de posibilidades que el área de machine learning ofrece. En contraste, las medidas

de asociación estadística entregan un único resultado debido a que no incorporan el uso de modelos particulares en sus procedimientos. Sus resultados son independientes del modelo. Dentro de estas medidas de asociación estadística se pueden mencionar el coeficiente de correlación de Pearson y las medidas de correlación por rangos de Kendall y Spearman. En el caso de Pearson, se asume que la relación entre las variables aleatorias involucradas es de tipo lineal, lo que es poco frecuente en problemas del grado de complejidad del área de la ciencia de materiales. De otra parte, las medidas de correlación por rangos funcionan para fenómenos no-lineales, pero solo si la función subyacente del fenómeno es de tipo monótona creciente ó decreciente; sin embargo, esta es una información que no se tiene. En contraste a las anteriores medidas, se tiene la medida de información mutua, la cual no adolece de restricciones de linealidad y monotonidad. En el presente trabajo se plantea utilizar la medida de información mutua a fin de cuantificar la cantidad de información contenida en las variables descriptoras del proceso de síntesis respecto a parámetros de desempeño de celdas solares de perovskita. Las medidas de desempeño corresponden al voltaje de circuito abierto, densidad de corriente de corto circuito, factor de llenado y eficiencia de conversión de potencia. La medida de información mutua (cantidad de información que aporta el descriptor respecto al parámetro de desempeño) se estima a partir de un conjunto de datos compuestos por más de 40000 observaciones experimentales de celdas de perovskita. A modo de resultado se encontró que las variables que aportan mayor información a la eficiencia de conversión de potencia son las concentraciones de los elementos utilizados para formar la película delgada de perovskita. Posteriormente, aparecen los materiales que se usan para el contacto posterior y la capa transportadora de huecos. Seguidamente está el espesor de la capa de perovskita. Cada una de estas variables aporta entre 1,2 bits y 1,8 bits de información. Teniendo en cuenta que el valor de cantidad de información correspondiente a la eficiencia de conversión de potencia dió como resultado 4,33 bits, entonces se deduce que el efecto de estas variables sobre la eficiencia de conversión de potencia es relativamente importante.

Pattern analysis in meteorological and biotic variables for modeling pest risks in avocado crops using machine and deep learning

Análisis de patrones en variables meteorológicas y bióticas para el modelamiento de riesgos por plagas en cultivos de aguacate mediante aprendizaje automático y profundo

T E Ramirez Guerrero¹, M I Hernández Pérez¹, M S Tabares Betancur¹, E Villanueva¹, and A Peña Palacio¹

¹ Universidad EAFIT, Medellín, Colombia

E-mail: japena@eafit.edu.co

Abstract. Crops in agriculture are affected by long-term trends in precipitation and average temperatures, disturbances during specific phases of plant development, and pest outbreaks due to weather variations. Improper pest management in Hass avocado crops can lead to fruit production losses and, in some cases, quarantine phytosanitary measures. Therefore, this paper presents a descriptive analysis to identify patterns related to climate changes (temperature and air humidity, precipitation, wind speed and direction, solar radiation) and tree phytosanitary status in a Hass avocado crop from eastern Antioquia, Colombia. Using the analytics solutions unified method in data mining, crop data collected periodically were processed: climate data are collected every 15 minutes through a weather station installed in the study area; phytosanitary data are collected every 15 days by monitoring and visual inspection of avocado trees. From this analysis, the aim is to have the basis to create a deep or machine learning model capable of determining the variations that lead to moderate and high levels of affectation, for the estimation of pest risk and the planning of its management in avocado crops. Results show the trend between pest damage and variations in temperature and humidity in the area, associated with soil conditions, from patterns since the actual event present in the crop. Thus, producers can conduct proper pest risk analysis, which is possible through the analysis of patterns in the physical climatic variables and biotic variables. In this aspect, the patterns will allow for estimating the behavior of pests in the avocado crop, to carry out proper pest risk management.

Resumen. Los cultivos agrícolas se ven afectados por las tendencias a largo plazo de las precipitaciones y las temperaturas medias, las perturbaciones durante fases específicas del desarrollo de la planta y los brotes de plagas debidos a variaciones meteorológicas; un uso inadecuado de las plagas en los cultivos de aguacate Hass puede ocasionar pérdidas en la producción de frutos y, en algunos casos, medidas fitosanitarias cuarentenarias. Por este motivo, este trabajo presenta un análisis descriptivo para identificar patrones relacionados con los cambios climáticos (temperatura y humedad del aire, precipitación, velocidad y dirección del viento, radiación solar) y el estado fitosanitario de los árboles en un cultivo de aguacate Hass del oriente antioqueño en Colombia. Utilizando el método unificado de soluciones analíticas en minería de datos, se procesaron datos del cultivo recolectados periódicamente: los datos climáticos se recolectan cada 15 minutos a través de una estación meteorológica instalada en la zona de estudio; los datos fitosanitarios se recolectan cada 15 días mediante monitoreo e inspección visual de los árboles de aguacate. A partir de este análisis, se busca tener las bases para crear un modelo de aprendizaje automático o profundo capaz de determinar las variaciones que conducen a niveles moderados y altos de afectación, para la estimación del riesgo por plagas y la planificación de su manejo en cultivos de aguacate. Los resultados muestran la tendencia entre el daño por plagas y las variaciones de temperatura y humedad en la zona, asociadas a las condiciones del terreno, a partir de patrones desde el suceso actual presente en el cultivo; en este aspecto, los patrones permitirán estimar el comportamiento de las plagas en el cultivo de aguacate, para llevar a cabo una adecuada gestión del riesgo de plagas.

Pattern recognition of two-phase flow in vertical pipes using artificial intelligence techniques

Reconocimiento de patrones de flujo bifásico en tuberías verticales mediante técnicas de inteligencia artificial

O A González-Estrada¹, C Ruiz Díaz², and B Quispe¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad de São Paulo, São Paulo, Brazil

E-mail: brayan.nos@hotmail.com

Abstract. The structuring of flow maps in the hydrocarbons industry has been developed from empirical correlations that integrate flow characteristics, such as superficial velocities and volumetric fractions, together with physical properties of the substances under analysis such as density and viscosity, in addition to using geometric parameters such as inclination and internal diameter of the pipes. Currently, technological advances have been developed that allow optimizing the flow pattern identification process, based on the implementation of artificial intelligence techniques, due to the fact that there are limitations to monitor the flow pattern generated inside the pipelines in offshore platforms, given the extreme working conditions that occur there. In this study, a long- and short-term memory recurrent neural network was developed, capable of predicting flow patterns generated inside vertical pipes. The long- and short-term memory network was trained and subsequently validated with the information contained in a database obtained from the literature, showing an error generated in the model predictions of less than 1%.

Resumen. La estructuración de mapas de flujo en la industria de hidrocarburos se ha desarrollado a partir de correlaciones empíricas que integran características del flujo, como velocidades superficiales y fracciones volumétricas, en conjunto con propiedades físicas de las sustancias en análisis como densidad y viscosidad, además de utilizar parámetros geométricos como la inclinación y el diámetro interno de las tuberías. En la actualidad, se han desarrollado avances tecnológicos que permiten optimizar el proceso de identificación de patrones de flujo, a partir de la implementación de técnicas de inteligencia artificial, debido a que existen limitaciones para monitorear el patrón de flujo generado al interior de las tuberías de las plataformas instaladas en altamar, dadas las condiciones de trabajo extremas que allí se presentan. En este estudio se desarrolló una red neuronal recurrente de memoria a largo y corto plazo, capaz de predecir los patrones de flujo generados al interior de tuberías verticales. La red memoria a largo y corto plazo fue entrenada y posteriormente validada con la información contenida en una base de datos obtenida de la literatura, mostrando un error generado en las predicciones del modelo inferior al 1%.

Simulation of robots' swarm aggregation using the Beeclust method

Simulación del agrupamiento de un enjambre de robots con el método Beeclust

Y Y Rios Diaz¹, O Acevedo-Patino², and L Garcia³

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad Tecnológica de Bolívar, Cartagena de Indias, Colombia

³ Universidad Simón Bolívar, Barranquilla, Colombia

E-mail: luis.garciag@unisimon.edu.co

Abstract. Swarm robotics studies a group behavior of homogeneous robots collaborating to achieve a common goal. The development of this robotics area has opened the possibility of solving various engineering problems, such as environmental monitoring, area recognition, and search & rescue operations. The controller design is the main challenge since each robot's behavior must be defined to achieve the task at the swarm level. The characteristics and properties of living organisms that exhibit swarm behavior have been studied to address the controller design challenge, thus, to define the individual behavior of each robot to achieve the task at the swarm level. These studies have identified fundamental behaviors, such as aggregation, which can be considered an essential behavior of the swarm due to the frequency with which this behavior appears and because it has been determined that aggregation is a preliminary step for the proper functioning of other swarm behaviors. This work presents a simulator developed in Matlab to study how the characteristics of the environment can guide the robot's aggregation through the Beeclust algorithm. The simulator allows the study of the swarm aggregation process and the factors that affect its efficiency. Simulation results are presented for different environmental scenarios and with different characteristics of the swarm, as well as two variants of the original algorithm that seek to improve its efficiency in aggregation. In some cases, the results are compared with those of similar works.

Resumen. La robótica de enjambres estudia el comportamiento de un grupo de robots homogéneos que colaboran para alcanzar un objetivo común. El desarrollo de esta área de la robótica ha abierto la posibilidad de resolver diferentes problemas de ingeniería, tales como, monitoreo de condiciones ambientales, reconocimiento de espacios, operaciones de búsqueda y rescate, entre otros. El diseño del controlador es uno de los principales desafíos, debido a que se debe definir el comportamiento individual de cada robot para lograr realizar la tarea a nivel de enjambre. Se han estudiado las características y propiedades de organismos vivos que presentan comportamiento de enjambre con el fin de abordar el desafío del diseño del controlador, es decir, definir el comportamiento individual de cada robot para lograr realizar la tarea a nivel de enjambre. Estos estudios han identificado comportamientos fundamentales, como la agregación, el cual puede ser considerado como un comportamiento esencial del enjambre debido a la frecuencia con la que aparece este comportamiento y debido a que se ha determinado que la agregación es un paso preliminar para el funcionamiento adecuado de otros comportamientos de enjambre. Este proyecto presenta un simulador desarrollado en Matlab con el propósito de estudiar cómo la agregación de robots puede ser guiada por las características del entorno, mediante el uso del algoritmo Beeclust. El simulador permite estudiar el proceso de agregación del enjambre y los factores que afectan su eficiencia. Se presentan resultados de simulaciones realizadas en diferentes escenarios ambientales y con diferentes características del enjambre, así como dos variantes del algoritmo original que buscan mejorar su eficiencia en la agregación. En algunos casos, se comparan los resultados obtenidos con los de otros trabajos similares.

Simulation of the electronic and structural properties of $\text{GaM}_x\text{As}_{1-x}$ doped with bi, p, sb atoms for possible applications in solar cells

Simulación de las propiedades electrónicas y estructurales del $\text{GaM}_x\text{As}_{1-x}$ dopado con átomos de bi, p, sb con posibles aplicaciones en celdas solares

M D M López Rendón¹, I Arellano¹, S Amaya-Roncancio², and E Restrepo Parra³

¹ Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia

² Universidad de la Costa, Barranquilla, Colombia

³ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: erestrepopa@unal.edu.co

Abstract. In this study, first-principles calculations are performed using density functional theory, to simulate the electronic and structural properties of the semiconductors $\text{G(aM)}_x \text{As}_{(x-1)}$, where $x=0,0.25,0.50,0.75,1$ and $M=\text{Bi, P, Sb}$, determining the viability of each compound for use in a solar cell. The electron-ion interaction was described with an ultrasoft scalar relativistic pseudopotential. Within the generalized gradient approximation, the Perdew-Burke-Ernzerhof exchange-correlation was used. The lattice parameter and the bulk modulus of all compounds were calculated by fitting the total energy versus volume data to the Birch-Murnaghan equation of state. The formation, cohesion, and substitutional energies of all systems are calculated. It is observed that the compounds GaP , $\text{G(aBi)}_{0.25} \text{As}_{0.75}$, and $\text{G(aSb)}_{0.25} \text{As}_{0.75}$ have the most stable structures and are more likely to form. Regarding the electronic properties, an analysis of the density of states, the projected density of states, and band structure are performed to determine the value of the band gap and which systems exhibit a direct optical band gap. The compounds $\text{G(aP)}_{0.25} \text{As}_{0.75}$ and $\text{G(aP)}_{0.75} \text{As}_{0.25}$ have a medium bandgap, exhibiting the behavior of semiconductor materials. The compounds with Sb and Bi doping show a narrow band gap, whereas doping with P increases the band gap. All the studied systems presented a direct optical band gap.

Resumen. En este estudio, se realizan cálculos de primeros principios utilizando la teoría del funcional de la densidad, para simular las propiedades electrónicas y estructurales de los semiconductores $\text{G(aM)}_x \text{As}_{(x-1)}$, donde $x=0, 0,25, 0,50, 0,75, 1,0$ y $M=\text{Bi, P, Sb}$, determinando la viabilidad de cada compuesto para su uso en una celda solar. La interacción electrón-ion se describió con un pseudopotencial relativista escalar ultrasuave. Dentro de la aproximación de gradiente generalizado, se utilizó la correlación de intercambio Perdew-Burke-Ernzerhof. El parámetro de red y el módulo volumétrico de todos los compuestos se calcularon ajustando los datos de energía total versus volumen a la ecuación de estado de Birch-Murnaghan. Se calculan las energías de formación, cohesión y sustitución de todos los sistemas. Se observa que los compuestos GaP , $\text{G(aBi)}_{0.25} \text{As}_{0.75}$, y $\text{G(aSb)}_{0.25} \text{As}_{0.75}$ tienen las estructuras más estables y es más probable que se formen. En cuanto a las propiedades electrónicas, se realiza un análisis de la densidad de estados, la densidad de estados proyectada y la estructura de bandas para determinar el valor de la banda prohibida y qué sistemas presentan una banda prohibida óptica directa. Los compuestos $\text{G(aP)}_{0.25} \text{As}_{0.75}$ y $\text{G(aP)}_{0.75} \text{As}_{0.25}$ tienen una banda prohibida media, mostrando el comportamiento de los materiales semiconductores. Los compuestos dopados con Sb y Bi muestran una banda prohibida estrecha, mientras que el dopado con P aumenta la brecha de banda. Todos los sistemas estudiados presentaron una banda prohibida óptica directa.

Statistical techniques based on variants of the geometric mean filter applied to 3D preprocessing of computed tomography medical images

Técnicas estadísticas basadas en variantes del filtro de media geométrica aplicadas al preprocesamiento 3D de imágenes médicas de tomografía computarizada

O Valbuena Prada¹,

¹ Universidad Simón Bolívar, San José de Cúcuta, Colombia

E-mail: oscar.valbuena@unisimon.edu.co

Abstract. The study, treatment and processing of medical images is of special interest in the clinical and imaging context due to its importance and contributions in the field of medicine and bioengineering with special interest in clinical diagnosis. Likewise, computed tomography is one of the fastest growing imaging modalities in clinical diagnostics. However, the images present imperfections that affect the quality of the information present in the images and hinder the identification and monitoring of relevant pathologies in the issuance of a more accurate diagnosis. To reduce the impact of imperfections, such as noise and artifacts, a preprocessing stage was carried out by applying a set of statistical techniques based on variants of the geometric mean filter, which were compared, from the point of view of efficiency and effectiveness with classical statistical techniques that have been widely reported in medical image preprocessing. During this stage, two 3D databases, one synthetic database and one computed tomography database, were preprocessed. For the validation of the preprocessing techniques, a set of statistical metrics was applied for quantitative and qualitative evaluation by visual inspection of the images. The results showed that the variant of the geometric mean filter that considers the square of the arithmetic mean, and the square of the variance obtained the best Score in the preprocessing with respect to the other techniques considered, with a time of 0.83 ± 0.0010 minutes and window size $3 \times 3 \times 3$.

Resumen. El estudio, tratamiento y procesamiento de las imágenes médicas, es de especial interés en el contexto clínico y de imagenología por su importancia y contribuciones en el ámbito de la medicina y la bioingeniería con especial interés en el diagnóstico clínico. Así mismo la tomografía computarizada es una de las modalidades de adquisición de imágenes de mayor crecimiento en los diagnósticos clínicos. Sin embargo, las imágenes presentan imperfecciones que afecta la calidad de la información presente en las imágenes y que dificultan la identificación y monitoreo de patologías relevantes en la emisión de un diagnóstico más preciso. Para disminuir el impacto de las imperfecciones, como ruidos y artefactos, se llevó a cabo una etapa de preprocesamiento mediante la aplicación de un conjunto de técnicas estadísticas basadas en variantes del filtro de media geométrica, las cuales fueron comparadas, desde el punto de vista de eficiencia y efectividad con técnicas estadísticas clásicas que han sido ampliamente reportadas en preprocesamiento de imágenes médicas. Durante esta etapa se preprocesaron dos bases de datos 3D, una base de datos sintética y una base de datos de tomografía computarizada. Para la validación de las técnicas de preprocesamiento se aplicó un conjunto de métricas estadísticas para la evaluación cuantitativa y cualitativa por inspección visual de las imágenes. Los resultados mostraron que la variante del filtro de media geométrica que considera el cuadrado de la media aritmética y el cuadrado de la varianza obtuvo el mejor Score en el preprocesamiento respecto a las otras técnicas consideradas, con un tiempo de $0,83 \pm 0,0010$ minutos y tamaño de ventana $3 \times 3 \times 3$.

Substitution of traditional materials with organic reinforcement composites

Sustitución de materiales tradicionales por compuestos de refuerzo orgánico

R A Cristancho Perilla¹, A D Pertuz Comas¹, L F Díaz Bermúdez¹, and L G García Vargas¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: lina2210387@correo.uis.edu.co

Abstract. Currently, environmental sustainability has become one of the biggest global challenges. The production of goods and services has historically been associated with the generation of polluting emissions, waste, and other negative environmental impacts. In order to reverse this trend, multiple solutions have been proposed, including the implementation of composite materials made from recycled and organic materials. Composite materials are formed from a matrix with certain mechanical properties and a reinforcement with different properties that complement the behavior of the developed piece. These materials offer a series of advantages over conventional materials, such as greater strength, durability, lightness, and the possibility of adapting to different designs and shapes. However, they also presented some challenges in their implementation, such as the appropriate selection of the materials that would compose the composite, the optimization of its design, and the evaluation of its environmental impact. In this context, a research project was carried out that aimed to substitute conventional materials to improve employability in the manufacture of parts with composite materials. The project focused on the characterization and improvement of the strength and stiffness properties of a bicycle part, by selecting different natural fiber reinforcements and epoxy matrix. Three types of natural fibers were selected to be used as reinforcement: palm fiber, sugarcane fiber, and powdered lignin. These fibers were chosen for their high strength and stiffness, as well as for their renewable and biodegradable origin. The mechanical properties of the epoxy matrix composites reinforced with these fibers were compared with those of the conventional materials used in the manufacture of bicycle parts. To carry out the comparison, the bicycle part was modeled using SolidWorks software and simulations of the different composite materials were carried out. The results showed that the epoxy matrix composites reinforced with natural fibers had similar or even superior mechanical properties to those of conventional materials, depending on their anisotropic design. In addition to the comparison of the mechanical properties, an environmental impact analysis was carried out between the composite materials addressed and the conventional materials, in order to determine their environmental footprint and evaluate their impact on the environment. Thus, it was found that natural fiber composite materials had a lower environmental footprint compared to conventional materials. In this sense, research in composite materials remains a constantly evolving field, which seeks to improve the properties and characteristics of existing materials, as well as explore new alternatives for their use in different areas. From a sustainable perspective, the use of composite materials in the manufacture of parts and components offers a promising alternative to reduce the environmental footprint of the industry and promote more responsible practices with the environment. In conclusion, research in composite materials has made significant advances in recent decades, with the development of new materials and manufacturing techniques. These materials offer a wide variety of applications in different sectors. In addition, the incorporation of biodegradable and recyclable materials in composites promotes more sustainable and responsible practices with the environment.

Resumen. En la actualidad, la sostenibilidad ambiental se ha convertido en uno de los mayores desafíos a nivel mundial. La producción de bienes y servicios ha estado históricamente asociada a la generación de emisiones contaminantes, residuos y otros impactos ambientales negativos. Con el fin de revertir esta tendencia, se han propuesto múltiples soluciones, entre ellas, la implementación de materiales compuestos provenientes de materiales reciclados y orgánicos. Los materiales compuestos se forman a partir de una

matriz con ciertas propiedades mecánicas y un refuerzo con otras propiedades diferentes que complementan el comportamiento de la pieza desarrollada. Estos materiales ofrecen una serie de ventajas sobre los materiales convencionales, tales como una mayor resistencia, durabilidad, ligereza y la posibilidad de adaptarse a diferentes diseños y formas. Sin embargo, también presentaban algunos desafíos en su implementación, como la selección adecuada de los materiales que componían el compuesto, la optimización de su diseño y la evaluación de su impacto ambiental. En este contexto, se realizó un proyecto de investigación que buscó la sustitución de materiales convencionales para mejorar la empleabilidad en la fabricación de piezas con materiales compuestos. El proyecto se enfocó en la caracterización y mejora de las propiedades de resistencia y rigidez de una pieza de bicicleta, mediante la selección de diferentes refuerzos de fibra de origen natural y la matriz epoxi. Se seleccionaron tres tipos de fibras de origen natural para ser utilizadas como refuerzo: la fibra de palma, la fibra de caña de azúcar y la lignina en polvo. Estas fibras fueron elegidas debido a su alta resistencia y rigidez, así como por su origen renovable y biodegradable. Se compararon las propiedades mecánicas de los compuestos de matriz epoxi reforzados con estas fibras con las de los materiales convencionales utilizados en la fabricación de piezas de bicicleta. Para llevar a cabo la comparación, la pieza de la bicicleta fue modelada utilizando el software SolidWorks y se llevaron a cabo simulaciones de los diferentes materiales compuestos. Los resultados obtenidos mostraron que los compuestos de matriz epoxi reforzados con fibras de origen natural tenían propiedades mecánicas similares o incluso superiores a las de los materiales convencionales, dependiendo esto de su diseño anisotrópico. Además de la comparación de las propiedades mecánicas, se realizó un análisis de impacto ambiental entre los materiales compuestos abordados y los materiales convencionales, con el fin de determinar su huella ambiental y evaluar su impacto en el medio ambiente. De esta forma, se encontró que los materiales compuestos de origen natural tenían una huella ambiental más baja en comparación con los materiales convencionales. En este sentido, la investigación en materiales compuestos sigue siendo un campo en constante evolución, que busca mejorar las propiedades y características de los materiales existentes, así como explorar nuevas alternativas para su uso en diferentes áreas. Desde una perspectiva sostenible, el uso de materiales compuestos en la fabricación de piezas y componentes ofrece una alternativa prometedora para reducir la huella ambiental de la industria y promover prácticas más responsables con el medio ambiente. En conclusión, la investigación en materiales compuestos ha tenido importantes avances en las últimas décadas, con el desarrollo de nuevos materiales y técnicas de fabricación. Estos materiales ofrecen una amplia variedad de aplicaciones en diferentes sectores. Además, la incorporación de materiales biodegradables y reciclables en los compuestos promueve prácticas más sostenibles y responsables con el medio ambiente.

Thermal distribution during friction stir welding of polymers using the finite elements method

Distribución térmica durante la soldadura por fricción agitación en polímeros utilizando el método de elementos finitos

J D Rodríguez¹, J A Mantilla Villalobos¹, R A Cristancho Perilla¹, O R Bohórquez Becerra¹,
and Y Y Ríos Díaz¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: yeriosdi@uis.edu.co

Abstract. Friction stir welding is a solid-state joining process that uses a rotating tool formed by a pin that applies pressure to the surface of the workpiece, generates heat through friction, and leads to the plasticization of the materials. Friction stir welding has been well received due to its effectiveness in joining various types of materials with poor weldability and producing high-quality joints without melting the materials, however, little numerical research has been developed to improve the process and its implementation in thermoplastics. In this study, a three-dimensional finite element model of friction stir welding in the thermoplastic polymer polymethyl methacrylate was developed using ABAQUS software, making use of the Coupled Eulerian-Lagrangian strategy, the Johnson-Cook law of materials, and the Coulomb law for friction. The parameters of feed rate and rotational speed of the tool were modified, being these the main variables of the friction stir welding. Temperature distributions were obtained for the different configurations, which allowed us to analyze and identify the thermal affectation zones of the process. The data used in the simulation are data obtained from the bibliography.

Resumen. La soldadura por fricción agitación es un proceso de unión en estado sólido que utiliza una herramienta giratoria formada por un pasador que aplica una presión en la superficie de la pieza de trabajo, genera calor a través de fricción y conduce a la plastificación de los materiales. La soldadura por fricción agitación ha tenido gran acogida debido a su eficacia para unir diversos tipos de materiales con poca soldabilidad, produciendo uniones de alta calidad sin fundir los materiales, sin embargo, se han desarrollado pocas investigaciones numéricas para mejorar el proceso y su implementación en termoplásticos. En este estudio se desarrolló un modelo tridimensional de elementos finitos de soldadura por fricción agitación en el polímero termoplástico poli metacrilato de metilo utilizando el software ABAQUS, haciendo uso de la estrategia de Coupled Eulerian-Lagrangian, la ley de materiales Johnson-Cook, y la ley de Coulomb para fricción. Se modificaron los parámetros de velocidad de avance y velocidad de rotación de la herramienta, siendo estas las variables principales de la soldadura por fricción agitación. Se obtuvieron las distribuciones de temperatura para las diferentes configuraciones, que permitieron analizar e identificar las zonas de afectación térmica del proceso. Los datos usados en la simulación son datos obtenidos de la bibliografía.

Thermo-pillars as anti-pinning centers in a superconducting cube

Termo-pilares como centros de anti-anclaje en un cubo superconductor

J J Barba Ortega¹, A Mosquera Polo², and C A Aguirre Tellez³

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia

³ Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, Brazil

E-mail: cristian@fisica.ufmt.br

Abstract. In the present work, we study the vortex matter in a superconducting in-homogeneous cube with a array of thermo-pillars, the sample is immersed in a magnetic field and inside of a homogeneous thermal bath. The presence of the thermo-pillars changes the vortex configuration in the superconducting cube considerably generating the confinement of the vortices in un-conventional configurations for a mono-band systems. We study the effect that the variation in temperature has on magnetic variables in these systems. We analyze the magnetic response of the sample with four and five thermo-pillars located in specific positions are considered. This study was carried out solving numerically the real three-dimensional Ginzburg-Landau equations.

Resumen. En el presente trabajo estudiamos el estado de vórtices en un cubo superconductor in-homogéneo con un arreglo de termo-pilares, la muestra se encuentra inmersa en un campo magnético y dentro de un baño térmico homogéneo. La presencia de los termo-pilares cambia considerablemente la configuración de los vórtices en el cubo superconductor generando el confinamiento de los vórtices en configuraciones no convencionales para un sistema mono-banda. Estudiamos el efecto que tiene la variación de temperatura sobre las variables magnéticas en estos sistemas. Analizamos la respuesta magnética de la muestra con cuatro y se consideran cinco termo-pilares ubicados en posiciones específicas. Este estudio se realizó resolviendo numéricamente las ecuaciones tridimensionales reales de Ginzburg-Landau.

Transfer matrix method in multilayer applications: a simulation

Método matriz de transferencia en aplicaciones multicapa: una simulación

R E Castiblanco Suárez¹, A Ferrero¹, and G A Méndez Merchán³

¹ Universidad Católica de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: gamendez@ucatolica.edu.co

Abstract. This document analyzes the propagation of electromagnetic radiation through stratified media, which forms systems that are usually known as photonic crystals. A first analysis includes a system composed by a thin film deposited in a substrate. The method of transfer matrix was used in order to simulate the system and thus obtain the behavior of the reflectance and transmittance functions. After extrapolating the transfer matrix method to include N stratified media, optical characteristics such as the band energy (forbidden energy) were obtained. In the current research, the method was applied to waveguides as a particular example; the influence of some parameters such as the dielectric constant, refractive index, thickness of the media, and frequency of the incident wave on the energy gap was determined. The simulation by means of the transfer matrix allowed to calculate the transmittance and reflectance of waveguide for systems with N media, whose thicknesses lie within the 10^{-9} m regime, showing the permitted energy levels. Additionally, the simulation is a reliable tool in order to study the approximate behavior of radiation through waveguides, allowing us to adjust the aforementioned parameters and determine if whether or not exotic, unexpected, or significantly relevant phenomena, which are worth studying, arise.

Resumen. La presente propuesta es un estudio en la propagación de la radiación electromagnética a través de medios estratificados, usualmente conocidos como cristales fotónicos. En un primer análisis se desarrolló un sistema conformado por una película delgada depositada sobre un sustrato. El sistema se simuló con el método de matriz de transferencia obteniendo el comportamiento de las funciones de transmitancia y reflectancia. En una extrapolación del método de matriz de transferencia para sistemas de N medios estratificados, se obtuvo características ópticas como el gap (energía prohibida). En el caso particular de la presente investigación el método se aplicó en guías de onda, en las que se determinó la dependencia del gap en función de parámetros como: constante dieléctrica, índice de refracción, espesor de los medios y frecuencia incidente. La simulación a través del método de matriz de transferencia permitió calcular la transmitancia y reflectancia en guías de onda para sistemas de N medios, con espesores del orden 10^{-9} m, mostrando los niveles de energía permitidos. Asimismo, la simulación es una herramienta confiable para estudiar el comportamiento aproximado de la radiación a través de guías de onda, permitiendo ajustar los parámetros mencionados previamente y determinar si existe el surgimiento de fenómenos exóticos, no esperados o con relevancia considerable que valgan la pena estudiar en detalle.

Type-I superconductivity: spike vortex state

Superconductividad tipo-I: estado de vórtices spike

J J Barba Ortega¹, M Rincón Joya¹, and C A Aguirre Téllez²

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, Brazil

E-mail: cristian@fisica.ufmt.br

Abstract. The spike vortex-state is a meta-stable state that is found lowering the magnetic fields near to the normal-superconducting transition in conventional type I samples for a determined Ginzburg-Landau parameter κ range. We can say that the spike state is originated by the expulsion of vortex-bubbles originated by deformation of a conventional giant-vortex, this process takes some nanoseconds, and occurs at an upper single field H_3 . The spike state is analyzed solving the time-dependent-Ginzburg-Landau equations numerically in FC and ZFC processes. We show the extrusion process for several geometries and selected a κ for a genuine type-I superconductor, we believe that the sharp edges play an important role in the formation and stability of the spike state because increasing the number of edges in the sample, will be easier the transition to the superconducting state.

Resumen. El estado de vórtice spike es un estado metaestable que se encuentra reduciendo los campos magnéticos cerca de la transición superconductor-normal en muestras tipo I convencionales dentro de un rango de parámetro de Ginzburg-Landau κ determinado. Podemos decir que el estado spike se origina por la expulsión de burbujas-de vórtices originadas por la deformación de un vórtice gigante convencional, este proceso toma algunos nanosegundos y ocurre en un solo campo superior H_3 . Analizamos el estado spike resolviendo numéricamente las ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo en procesos FC and ZFC. Mostramos el proceso de extrusión para varias geometrías y seleccionamos un κ para un superconductor tipo I genuino, creemos que los bordes afilados juegan un papel importante en la formación y estabilidad del estado de pico porque al aumentar el número de bordes en la muestra será más fácil la transición al estado superconductor.

New Materials (NM)

Nuevos Materiales (NM)

Ab-initio study of the capture of lead using the T-MnO₂/graphene interface

Un estudio ab-initio sobre la captura de plomo mediante la interfaz T-MnO₂/grafeno

C Ortega López¹, J V Dita Casiano¹, and L Sánchez Pacheco¹

¹ Universidad De Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: luiscarlos@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. This work discusses the study of the adsorption of a lead atom on the surface of a T-MnO₂/graphene interface. The calculations are based on the density functional theory within the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation with ultrasoft pseudopotentials and a periodic slab scheme. A 1T-MnO₂ monolayer is coupled to a graphene monolayer with a mismatch below 3%. In this case, graphene is only used as a substrate for the 1T-MnO₂ monolayer. To satisfy the coupling conditions, the 1T-MnO₂ 3×3/graphene - 2√3 × 2√3 structure is selected. The study of the most favorable adsorption model involves considering special sites TM1 (located just above a manganese atom, which is exactly above a carbon atom), TM2 (located just above a manganese atom, which is exactly above the center of the graphene hexagon), TO1 (located just above a carbon atom, belonging to the lower plane), and TO2 (located just above an oxygen atom, belonging to the upper plane). The most favorable structure in terms of energy is the Cd-TO1 model, or ad-atom cadmium model, located in the TO1 site, with an adsorption energy of -4.0 eV. This adsorption site is also the most favorable in terms of energy for the adsorption of mercury and cadmium atoms over the T-MnO₂/graphene heterostructure, with an adsorption energy of -0.4 eV and -0.6 eV, respectively. The value of the obtained adsorption energy is more negative than the ones reported for mercury and cadmium, hence the obtained absolute value is higher than the reported one (about 1.66 times higher than the mercury value and 10 times higher than the cadmium value). The calculations in this work are more favorable in terms of energy compared to the reported values. Nonetheless, both results lead to the conclusion that the T-MnO₂/graphene interface could be used as part of a device to capture heavy toxic metals such as mercury, cadmium, and lead. Lastly, the length of the lead-heterostructure bond is 1.66 Å, while the bond lengths for mercury and cadmium heterostructures are approximately 2.68 Å and 1.96 Å, respectively. The obtained adsorption energy and bond length lead to conclude that the results of this work are closer to chemical adsorption compared to the mercury and cadmium - heterostructure counterparts.

Resumen. En este trabajo, se hace un estudio de la adsorción de un átomo de plomo sobre la superficie de la interfaz T-MnO₂/grafeno. Los cálculos se realizan usando la teoría funcional de densidad dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof con pseudopotenciales ultrasuaves y una base de ondas planas. La interfaz se modela utilizando el esquema de slab periódico. Una monocapa 1T-MnO₂ se acopla a una monocapa de grafeno con un desajuste (mismatch) menor al 3%. En este caso, el grafeno solo se usa como un sustrato para la monocapa 1T-MnO₂. Para satisfacer la condición del acople, se escoge la reconstrucción 1T-MnO₂-3×3/grafeno-2√3×2√3. Para estudiar el modelo de adsorción más favorable, se consideran los sitios especiales TM1 (ubicado justo encima de un átomo de manganeso, el cual se encuentra justo encima de un átomo de carbono), TM2 (ubicado justo encima de un átomo de manganeso, el cual se encuentra justo encima del centro del hexágono de grafeno), TO1 (ubicado justo encima de un átomo de oxígeno, perteneciente al plano inferior) y TO2 (ubicado justo encima de un átomo de oxígeno, perteneciente al plano superior). Se encuentra que la estructura energéticamente más favorable corresponde al modelo Cd-TO1 o modelo ad-átomo de cadmio localizado en el sitio TO1, con una energía de adsorción de -4,0 eV. Este sitio de adsorción, es también el energéticamente más favorable para la adsorción de un átomo de mercurio y cadmio sobre la heteroestructura T-MnO₂/grafeno, con una energía de adsorción de

-0,4 eV y -0,6 eV, respectivamente. El valor de la energía de adsorción de nuestro calculo es más negativo que el reportado para el mercurio y cadmio, luego el valor absoluto de nuestro calculo es mayor que el reportado (es alrededor de 1,66 veces mayor que la del mercurio y 10 veces mayor que la del cadmio). Por lo tanto, nuestro calculo es energéticamente más favorable que el reportado. No obstante, de ambos resultados, se puede establecer que la interfaz T-MnO₂/grafeno se podría utilizar como componente de un dispositivo para la captura de metales pesados tóxicos tales como mercurio, cadmio y plomo. Finalmente, la longitud del enlace plomo - heteroestructura es aproximadamente 1,66 Å, mientras que la longitud de enlace del mercurio y cadmio - heteroestructuras reportadas, son aproximadamente 2,68 Å y 1,96 Å, respectivamente. De acuerdo con el análisis de estos dos resultados (energía de adsorción, longitud de enlace), podríamos inferir que nuestros resultados se acercan más a una quimiadsorción que los reportados para mercurio y cadmio - heteroestructura T-MnO₂/grafeno.

Adsorption of mercury species on the T-MnO₂ monolayer: a first-principles study

Adsorción de especies de mercurio sobre la monocapa T-MnO₂: un estudio de primeros principios

C Ortega López¹, J M Osorio Guillen², and J D Morinson Negrete¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

² Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

E-mail: jdmorinson1984@hotmail.com

Abstract. This research pertains to a study of the adsorption of mercury species Hg⁰, HgCl and HgCl₂ on the surface of the T-MnO₂ monolayer. The calculations are based on the density-functional theory within the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation with the plane-wave pseudopotential method. The periodic slab scheme is used to model the T-MnO₂ monolayer. The study of the most favorable adsorption model considers the special sites TM (located just above a manganese atom), TO1 (located just above an oxygen atom in the lower plane) and TO2 (located just above an oxygen atom in the upper plane). Regarding the adsorption of elemental mercury Hg⁰, it is concluded that the most favorable structure in terms of energy is the Hg⁰-TO1 model, also known as the Hg⁰ ad-atom model located at the TO1 site with an adsorption energy of -0.36 eV. The most favorable models for HgCl and HgCl₂ in terms of energy are the HgCl-TM ad-molecule (with mercury models facing downwards or closer to the surface than the chlorine atom) and the HgCl₂-TM (with the HgCl₂ molecule parallel to the surface and the Hg atom located just above the TM site), with adsorption energies of -1.84 eV and -0.49 eV, respectively. It is concluded that the T-MnO₂ monolayer could serve as a component of a device that captures mercury species. Lastly, some dissociation scenarios are explored for HgCl and HgCl₂.

Resumen. En este trabajo, se hace un estudio de la adsorción de especies de mercurio Hg⁰, HgCl y HgCl₂ sobre la superficie de la monocapa T-MnO₂. Los cálculos se realizan usando la teoría funcional de densidad dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof con pseudopotenciales ultrasuaves y una base de ondas planas. Para modelar la monocapa T-MnO₂, se usa el esquema del slab periódico. Para estudiar el modelo de adsorción más favorable, se consideran los sitios especiales TM (ubicado justo encima de un átomo de manganeso), TO1 (ubicado justo encima de un átomo de oxígeno, perteneciente al plano inferior) y TO2 (ubicado justo encima de un átomo de oxígeno, perteneciente al plano superior). Para la adsorción de mercurio elemental se encuentra que la estructura energéticamente más favorable corresponde al modelo Hg⁰-TO1 o modelo ad-átomo de Hg⁰ localizado en el sitio TO1, con una energía de adsorción de -0,36 eV, mientras que los modelos energéticamente más favorables para la adsorción de HgCl y HgCl₂ corresponden a los modelos ad-molécula de HgCl-TM (con el átomo de mercurio hacia abajo o más cercano a la superficie que el átomo de cloro) y HgCl₂-TM (con la molécula HgCl₂ paralela a la superficie y átomo de mercurio ubicado justo encima de sitio TM), con valores de las energías de adsorción de -1,84 eV y -0,49 eV, respectivamente. De estos resultados, se puede establecer que la monocapa T-MnO₂ se podría utilizar como componente de un dispositivo para la captura de especies de mercurio. Finalmente, se exploran algunos escenarios de disociación de las moléculas HgCl y HgCl₂.

A study of the electronic properties of the g-ZnO/graphene interface with and without impurities derived from chrome, manganese, and copper

Un estudio de las propiedades electrónicas de la interfaz g-ZnO/grafeno con y sin impurezas de cromo, manganeso y cobre

M J Espitia-Rico¹, C Ortega López², and G Berrioc²

¹ Universidad Distrital Francisco José Caldas, Bogotá, Colombia

² Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: gberrioc@gmail.com

Abstract. This work discusses the study of the structural and electronic properties of the g-ZnO/graphene interface with and without substitutions of zinc atoms by chrome, manganese, and copper atoms. The calculations are based on the density functional theory within the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation with ultrasoft pseudopotentials and a plane wave basis. The interface is modeled using the periodic slab scheme. A g-ZnO monolayer is coupled to a graphene monolayer with a mismatch below 3%. To satisfy the coupling conditions, the g-ZnO 3×3/graphene 4×4 reconstruction is selected. For substitutions of zinc atoms at the interface, some zinc atoms located at special lattice points are chosen zinc located at the origin of the coordinate system (point I), zinc located just above a point centered on the hexagon of the substrate graphene (point II) and zinc located just above a carbon atom (point III). The electronic properties of the g-ZnO/graphene interface with and without chromium, manganese and copper impurities are established through the density of states, band structure and Bader or Löwdin charge.

Resumen. En este trabajo, se realiza un estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de la interfaz g-ZnO/grafeno con y sin sustituciones de átomos de zinc por átomos cromo, manganeso y cobre. Los cálculos se realizan usando la teoría funcional de densidad dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof con seudopotenciales ultrasuaves y una base de ondas planas. La interfaz se modela utilizando el esquema de slab periódico. Una monocapa de g-ZnO se acopla a una monocapa de grafeno con un desajuste menor al 3%. La monocapa de grafeno solo se usa como un sustrato para la monocapa g-ZnO. Para satisfacer la condición de acople, se escoge la reconstrucción g-ZnO 3×3/grafeno 4×4. Para las sustituciones de átomos de zinc en la interfaz, se escogen algunos átomos de zinc ubicados en puntos especiales de la red: zinc ubicado en el origen del sistema de coordenadas (punto I), zinc ubicado justo por encima de un punto centrado en el hexágono del sustrato grafeno (punto II) y zinc ubicado justo por encima de un átomo de carbono (punto III). Las propiedades electrónicas de la interfaz g-ZnO/grafeno con y sin impurezas de cromo, manganeso y cobre, se establecen a través de la densidad de estados, estructura de bandas y carga Bader o Löwdin.

Biodegradability of cassava starch-based biofilms exposed in simulated soil

Biodegradabilidad de biopelículas basadas en almidón de yuca expuestas en suelo simulado

A Arrieta Almario¹, M F Acosta Humánez², and J Ducuara¹

¹ Universidad de Sucre, Sincelejo, Colombia

² Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: jaducuarah@gmail.com

Abstract. Biodegradability is a parameter that allows us to determine and measure the environmental behavior of chemical substances, to determine the properties of the products that are intended to be released into the natural environment. Studying the biodegradation of polymers based on renewable sources becomes important since these processes allow us to identify structural changes in the compound or imply its conversion into inorganic products of low molecular weight. In this aspect, biofilms based on starch were synthesized via a thermal method, using (1.0 g), GLY (1.0 g), PEG (1.0 g), and GLU (1.0 g) chemical compounds; starch biofilms were tested for biodegradability, using simulated soil prepared with 23% silty silt, 23% organic matter (cow excrement), 23% sand, and 31% distilled water, biofilm samples were exposed to the simulated soil and packed in sealed perforated bags. The bags were buried in the ground 10 cm deep. Biodegradation was monitored for 3 weeks, every 3 days mass variation was measured, buried samples were recovered, washed with distilled water, dried at room temperature, and weighed, after measuring the mass was analyzed by FTIR, and the samples were again buried. The experiments were conducted in triplicate. The biofilms from the third day began the loss of mass due to the decrease in moisture of the polymer, after 8-10 days the mass loss was 68%-75% concerning the initial mass, by the action of endoenzymes of the microorganisms present in the organic matter, in which break the bonds of the internal chain randomly, resulting in a rapid decrease in molecular mass, due to the sequential cleavage of the terminal segments, leading to immediate changes, forming smaller molecules such as monomers and oligomers. After 13 days, tiny samples were obtained, and the mass loss corresponded to 99% of the initial mass, finally, on days 15 and 16 were no traces of biopolymers. FTIR analyses showed the functional groups' intensity loss, due to biodegradation. Therefore, the biodegradability tests demonstrated that starch polymers are biodegradable in simulated soil, the biodegradation period was between 13-16 days, and organic matter plays a key role in the process thanks to the presence of microorganisms, which break bonds decreasing the molecular mass of polymers transforming them into monomers assimilable in the medium.

Resumen. La biodegradabilidad es un parámetro que permite determinar y medir el comportamiento ambiental de las sustancias químicas, con el fin de determinar las propiedades de los productos que se pretenden liberar al medio ambiente natural. Estudiar la biodegradación de polímeros basados en fuentes renovables resulta ser importante, ya que estos procesos permiten identificar cambios estructurales del compuesto, o implicar su conversión en productos inorgánicos de bajo peso molecular. En este aspecto, se sintetizaron unas biopelículas basadas en almidón (1,0 g), GLY (1,0 g), PEG (1,0 g) y GLU (1,0 G), usando el método térmico; a estas se le realizaban pruebas de biodegradabilidad, usando suelo simulado preparado con 23% de limo limoso, 23% de materia orgánica (estiércol de vaca), 23% de arena y 31% de agua destilada, las muestras de biopelícula se expusieron al suelo simulado y se empacaron en unas bolsas sellables agujereadas. Las bolsas se enterraron en el suelo a 10 cm de profundidad. La biodegradación se controló durante 3 semanas, cada 3 días se medía la variación de masa, las muestras enterradas se recuperaron, se lavaron con agua destilada, se secaron a temperatura ambiente y se pesaron, después de medir la masa se analizaba mediante FTIR, las muestras nuevamente fueron enterradas. Los experimentos

se realizaron por triplicado. Las biopelículas a partir del tercer día iniciaba la pérdida de masa debido a la disminución de humedad del polímero, al transcurrir los 8-10 días la masa perdida fue del 68%-75% en relación a la masa inicial, por acción de endoenzimas de los microorganismos presentes en la materia orgánica, los cuales rompen los enlaces de la cadena interna al azar, lo que da como resultado una rápida disminución de la masa molecular, debido a la escisión secuencial de los segmentos terminales, conduciendo a cambios inmediatos, formándose moléculas más pequeñas como monómeros y oligómeros. Al transcurrir los 13 días se obtuvieron muestras diminutas, la pérdida de masa correspondía al 99% de la masa inicial, por último, al día 15 y 16 no había rastros de los biopolímeros; los análisis de FTIR mostraban la pérdida de intensidad de los grupos funcionales, a causa de la biodegradación. Por consiguiente, las pruebas de biodegradabilidad permitieron demostrar que los polímeros de almidón son biodegradables en suelo simulado, el periodo de biodegradación fue entre 13-16 días, la materia orgánica juega un papel clave en el proceso gracias a la presencia de microorganismos, los cuales rompen enlaces disminuyendo la masa molecular de los polímeros transformándolos en monómeros asimilables en el medio.

Biodegradable polymer of cassava starch (*manihot esculenta*) and cardol extracted from cashew nutshell oil

Polímero biodegradable de almidón de yuca (*manihot esculenta*) y cardol extraído del aceite de la cáscara de la nuez de anacardo

A Arrieta Almario¹, M F Acosta Humánez², and J Ducuara¹

¹ Universidad de Sucre, Sincelejo, Colombia

² Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: jaducuarah@gmail.com

Abstract. The main constituents of cashew nutshell oil are phenolic compounds with long-chain substitution at the meta position. These compounds give most of the reactions of phenol and can be the basis for producing a series of polymeric substances of utility in industrial applications. Cashew nutshell oil, which has a considerable cost-benefit ratio, can be a substitute for phenol in many applications. The use of cashew nutshell oil instead of phenol is an excellent example of preserving a synthetically derived substance and using an economical agricultural product. Cardol is a relatively less explored component of cashew nutshell oil that chemically offers resorcinol substituted with a 15-carbon chain and predominantly contains a mixture of one, two, and three double bonds. Biofilms based on starch (1.0 g), GLY (1.0 g), PEG (1.0 g), and GLU (1.0), as well as cardol, were synthesized in different concentrations, and the biofilms were characterized by FTIR. The electrochemical properties were studied by cyclic voltammetry, with a potentiostat/galvanostat Gamry 1010E. Cyclic voltammetry was recorded at 10, 50, 100, 200, 400, 600, 800, and 1000 mV s⁻¹ scanning speed. Biodegradability tests were performed using simulated soil prepared with 23% silty silt, 23% organic matter (cow feces), 23% sand and 31% distilled water. The experiments were developed in triplicate. The biofilms composed of starch/cardol presented a brown color and better consistencies than those synthesized based on starch. The FTIR spectra of the biopolymer composite film revealed the presence of the OH group at 3600 cm⁻¹-3700 cm⁻¹, this is present in cardol and starch. At 3000 cm⁻¹ aromatic hydrogens (Ar-H) are shown, the bands at 2922 cm⁻¹- 2800 cm⁻¹ are associated with the aliphatic C-H bond present in cardol, at 1608 cm⁻¹ the C=C aliphatic bond is shown, and at 1452 cm⁻¹ showed the presence of the C=C aromatic bond of the benzene ring. The oxidation-reduction processes peaks observed in the composite biopolymer films can be assigned to the redox processes of the starch and cardol glucose units present in the biopolymer matrix. Voltammetric sweep at different speeds showed a diffusion-controlled process, such that the electrochemical response depends on the movement of charges within the polymer matrix. The biodegradability test showed that the biofilms composed of starch/cardol degraded slower, this occurs due to the presence of phenolic compounds because they are assimilated by microorganisms and is an additional process in the degradation of the material. A new bioactive biopolymer compound, with a biological and biodegradable base, was synthesized from cassava starch and cardol extracted from cashew shell liquid. The effect of the amount of cardol and the pH of synthesis was studied. The study concluded that the biopolymer was stable to manual traction and the presence of cardol, as well as to the use of basic pH for its synthesis.

Resumen. Los principales constituyentes del aceite de la cáscara de la nuez del anacardo son compuestos fenólicos con sustitución de cadena larga en la posición meta. Estos compuestos dan la mayoría de las reacciones del fenol y pueden ser la base para producir una serie de sustancias poliméricas de amplia utilidad en aplicaciones industriales. El aceite de la cáscara de la nuez del anacardo, tiene una considerable relación costo-beneficio, puede ser un sustituto del fenol en muchas aplicaciones. El uso de aceite de la cáscara de la nuez del anacardo en lugar de fenol es un excelente ejemplo de conservación de una sustancia derivada sintéticamente y la utilización de un subproducto agrícola económico. El cardol es un componente

relativamente menos explorado de aceite de la cáscara de la nuez del anacardo que químicamente ofrece resorcinol sustituido con cadena de 15 carbonos en el que la cadena lateral, que contiene predominantemente una mezcla de uno, dos y tres dobles enlaces. Se sintetizaron unas biopelículas basadas en almidón (1,0 g), GLY (1,0 g), PEG (1,0 g) y GLU (1,0) y cardol en diferentes concentraciones, se caracterizaron las biopelículas mediante FTIR. Las propiedades electroquímicas se estudiaron mediante voltamperometría cíclica, con un potenciostato/galvanostato Gamry 1010E. La voltamperometría cíclica se registró a una velocidad de barrido de 10, 50, 100, 200, 400, 600, 800 y 1000 mV s⁻¹; se realizaron pruebas de biodegradabilidad usando suelo simulado preparado con 23% de limo limoso, 23% de materia orgánica (estiércol de vaca), 23% de arena y 31% de agua destilada. Los experimentos se realizaron por triplicado. Las biopelículas compuestas de almidón/cardol presentaron un color pardo y mejor consistencias que las sintetizadas basadas en almidón. Los espectros FTIR de la película compuesta de biopolímero revelaron la presencia del grupo hidroxilo (-OH) a 3600 cm⁻¹-3700 cm⁻¹, este está presente en cardol y almidón. A 3000 cm⁻¹ se muestran hidrógenos aromáticos (Ar-H), las bandas a 2922 cm⁻¹-2800 cm⁻¹ se asocia con el enlace C-H alifático presente en cardol, a 1608 cm⁻¹ se muestra el enlace C=C alifático y a 1452 cm⁻¹ la presencia del enlace C=C aromático del anillo bencénico. Los picos de los procesos de oxidación-reducción observados en las películas de biopolímero compuesto se pueden asignar a los procesos redox de las unidades de glucosa de almidón y cardol presentes en la matriz biopolimérica. El barrido voltamperométrico a diferentes velocidades mostró un proceso controlado por difusión, de tal forma que la respuesta electroquímica depende del movimiento de cargas dentro de la matriz polimérica. La prueba de biodegradabilidad demostró que las biopelículas compuestas de Almidón/Cardol se degradaban más lento, esto ocurre por la presencia de los compuestos fenólicos, debido a que son asimilados por microorganismos y es un proceso adicional en la degradación del material. Se sintetizó un nuevo compuesto de biopolímero electroactivo de base biológica y biodegradable a partir de almidón de mandioca y cardol extraído del líquido de cáscara de marañón. Se estudió el efecto de la cantidad de Cardol y el pH de síntesis. En el estudio se concluyó que el biopolímero fue estable a la tracción manual y a la presencia de cardol, así como al uso de pH básico para su síntesis.

Capture of arsenic on graphene-like hexagonal zinc oxide monolayer surfaces with and without graphene substrate

Captura de arsénico sobre las superficies de la monocapa oxido de zinc hexagonal planar con y sin el sustrato grafeno

M J Espitia-Rico¹, C Ortega López², and G Berrioc²

¹ Universidad Distrital Francisco José Caldas, Bogotá, Colombia

² Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: gberrioc@gmail.com

Abstract. This study focuses on the adsorption of an arsenic atom on the graphene-like hexagonal zinc oxide monolayer with and without graphene substrate. The calculations are based on the density functional theory within the generalized gradient approximation of Perdew-Burke-Ernzerhof with pseudo-potentials and a plane wave basis, as seen in the Quantum-Espresso package. The monolayer and interface are modeled using the supercell scheme, or periodic slab. Regarding the interface, a graphene-like hexagonal g-ZnO monolayer is coupled to a graphene monolayer with a mismatch below 3%. In this case, graphene is only used as a substrate for the ZnO monolayer. To meet the coupling conditions, the reconstruction g-ZnO 2×2 /graphene $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ is chosen. The study of the most favorable adsorption model in the monolayer involved considering special sites H (located at the center of a hexagon of the g-ZnO monolayer), TO (located just above an oxygen atom and without a carbon atom underneath), TZn (located just above a zinc atom and without a carbon atom underneath), TO-C (located just above an oxygen atom and having a carbon atom underneath), and TZn-C (located just above a zinc atom and having a carbon atom underneath). Regarding the monolayer, it is determined that the most energetically favorable structure is the As-H model, or arsenic ad-atom model, located in the H site, with an adsorption energy of -1.84520 eV. Regarding the interface, the most favorable structure is the As-TO model, or arsenic ad-atom model, located in the TO site, with an adsorption energy of 2.29936 eV. It is concluded that the graphene substrate is useful for capturing heavy and toxic arsenic atoms.

Resumen. En este trabajo, se hace un estudio de la adsorción de un átomo de arsénico sobre la superficie de la monocapa oxido de zinc hexagonal planar con y sin el sustrato grafeno. Los cálculos se realizan usando la teoría funcional de densidad dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof con pseudo-potenciales ultrasuaves y una base de ondas planas como se implementa en el paquete Quantum-Espresso. La monocapa e interfaz se modela utilizando el esquema de supercelda o de slab periódico. En el caso de la interfaz, una monocapa de g-ZnO hexagonal planar se acopla a una monocapa de grafeno con un desajuste menor al 3%. En este caso, el grafeno solo se usa como un sustrato para la monocapa ZnO. Para satisfacer la condición del acople, se escoge la reconstrucción g-ZnO 2×2 /grafeno $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$. Para estudiar el modelo de adsorción más favorable, en la monocapa, se consideran los sitios especiales H (ubicado en el centro de un hexágono de la monocapa g-ZnO), TO (ubicado justo encima de un átomo de oxígeno), TZn (ubicado justo encima de un átomo de zinc) TO-C (ubicado justo encima de un átomo de oxígeno y con un átomo de carbono por debajo) y TZn-C (ubicado justo encima de un átomo de zinc y con un átomo de carbono por debajo). Para la monocapa, se encuentra que la estructura energéticamente más favorable corresponde al modelo As-H o modelo ad-átomo de arsénico localizado en el sitio H, con una energía de adsorción de -1,84520 eV; mientras que, para la interfaz, la estructura energéticamente más favorable corresponde al modelo As-TO o modelo ad-átomo de arsénico localizado en el sitio TO, con una energía de adsorción de -2,29936 eV. De estos resultados, se infiere que el sustrato grafeno favorece la captura del átomo pesado tóxico arsénico.

Capture of cadmium using the T-MnO₂/graphene interface

Captura de cadmio mediante la interfaz T-MnO₂/grafeno

J V Dita Casiano¹, C Ortega López¹, and J D Morinson Negrete¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: juanmorinson@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. This work discusses the study of the adsorption of a cadmium atom on the density functional theory within the Perdew-Burke- Ernzerhof generalized gradient approximation with ultrasoft pseudopotentials and a basis of plane waves. The interface is modeled using the periodic slab scheme. A T-MnO₂ monolayer is coupled to a graphene monolayer with a mismatch below 3%. In this case, graphene is only used as a substrate for the T-MnO₂ monolayer. To satisfy the coupling conditions, the T-MnO₂-3×3/graphene-2√3×2√3 reconstruction is chosen. The study of the most convenient adsorption model involved considering special sites TM1 (located just above a manganese atom, which is exactly above a carbon atom), TM2 (located just above a manganese atom, which is exactly above the center of the graphene hexagon), TO1 (located just above an oxygen atom, belonging to the lower plane), and TO2 (located just above an oxygen atom, belonging to the upper plane). The most favorable structure in terms of energy corresponds to the Cd-TO1 model or the ad-atom cadmium model located in the TO1 site, with an adsorption energy of -0.6 eV. This adsorption site is also the most energetically favorable for the adsorption of a mercury atom on the T-MnO₂/graphene heterostructure, with an adsorption energy of -0.4 eV. The obtained adsorption energy has a more negative value than the one stated for mercury, yet the obtained absolute value is higher than the one stated for mercury (about 1.66 times higher). Lastly, the length of the cadmium - heterostructure bond is approximately 1.96 Å, while the length of the mercury - heterostructure bond is approximately 2.68 Å. The obtained adsorption energy and bond length lead to conclude that the results of this work are closer to a chemical adsorption compared to the mercury - heterostructure counterpart.

Resumen. En este trabajo, se hace un estudio de la adsorción de un átomo de cadmio sobre la superficie de la interfaz T-MnO₂/grafeno. Los cálculos se realizan usando la teoría funcional de densidad dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof con pseudopotenciales ultrasuaves y una base de ondas planas. La interfaz se modela utilizando el esquema de slab periódico. Una monocapa T-MnO₂ se acopla a una monocapa de grafeno con un desajuste menor al 3%. En este caso, el grafeno solo se usa como un sustrato para la monocapa T-MnO₂. Para satisfacer la condición del acople, se escoge la reconstrucción T-MnO₂-3×3 /grafeno-2√3×2√3. Para estudiar el modelo de adsorción más favorable, se consideran los sitios especiales TM1 (ubicado justo encima de un átomo manganeso, el cual se encuentra justo encima de un átomo de carbono), TM2 (ubicado justo encima de un átomo de manganeso, el cual se encuentra justo encima del centro del hexágono de grafeno), TO1 (ubicado justo encima de un átomo de oxígeno, perteneciente al plano inferior) y TO2 (ubicado justo encima de un átomo de oxígeno, perteneciente al plano superior). Se encuentra que la estructura energéticamente más favorable corresponde al modelo Cd-TO1 o modelo ad-átomo de cadmio localizado en el sitio TO1, con una energía de adsorción de -0,6 eV. Este sitio de adsorción, es también el energéticamente más favorable para la adsorción de un átomo de mercurio sobre la heteroestructura T-MnO₂/grafeno, con una energía de adsorción de -0.4 eV. El valor de la energía de adsorción de nuestro calculo es más negativo que el reportado para el mercurio, luego el valor absoluto de nuestro calculo es mayor que el reportado (es alrededor de 1,666 veces mayor que el del mercurio). Finalmente, la longitud del enlace cadmio - heteroestructura es aproximadamente 1,96 Å, mientras que la longitud de enlace del mercurio – heteroestructura reportada, es aproximadamente 2,68 Å. De acuerdo con el análisis de esto dos resultados (energía de adsorción, longitud de enlace), podríamos inferir que nuestros resultados se acercan más a una adsorción química que los reportados para mercurio - heteroestructura.

Characterization of structural properties and of the surface on the electronics of titanium dioxides with cerium impurity

Caracterización de propiedades estructurales y electrónicas de la superficie de dióxido de titanio con impureza de cerio

G R Casiano Jiménez¹, L A Alcalá Varilla¹, and L Pájaro Polo¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: lpajaropolo@correo.unicordoba.edu.co

Abstract. In the present work, the structural and electronic properties of titanium dioxide surfaces are established, with the addition of cerium impurities. For this, first principles simulations are carried out within the framework of the density functional theory applying the pseudopotential method, implemented in the Quantum Espresso computational package. For the electron–electron interaction, the generalized gradient approximation is used in the Perdew-Burke-Ernzerhof parameterization and, in addition, the Hubbard U correction for atoms was taken into account titanium. Initially, the structural parameters were optimized; in this instance, the ground state energy of the clean surface and the doped surface are determined. From calculations of the density of states, it is inferred that the clean surface presents a semiconductor character, while, by introducing a cerium atom on the surface of the titanium dioxide, this reduces the energy band, providing better use of the visible spectrum. The cerium impurity on the titanium dioxide surface could favor a greater photocatalytic activity in the degradation of contaminants and increase the oxidative capacity of titanium dioxide.

Resumen. En el presente trabajo, se establecen las propiedades estructurales y electrónicas de las superficies de dióxido de titanio con la adición de impurezas de cerio. Para ello, se realizan simulaciones de primeros principios en el marco de la teoría de la funcional de la densidad aplicando el método de pseudopotencial, implementado en el paquete computacional Quantum Espresso. Para la interacción electrón–electrón se utiliza la aproximación de gradiente generalizado en la parametrización de Perdew-Burke-Ernzerhof y, además, se tuvo en cuenta la corrección de Hubbard U para los átomos de titanio. Inicialmente, se optimizaron los parámetros estructurales; en esta instancia, se determina la energía del estado base de la superficie limpia y de la superficie dopada. A partir de cálculos de la densidad de estados, se infiere que la superficie limpia presenta un carácter semiconductor, mientras que, al introducir un átomo de cerio en la superficie del dióxido de titanio, éste reduce la banda de energía, brindando mejor aprovechamiento del espectro visible. La impureza de cerio en la superficie de dióxido de titanio, podría favorecer una mayor actividad fotocatalítica en la degradación de contaminantes e incrementar la capacidad oxidativa del dióxido de titanio.

Cyclic use of a pumice-based geopolymer for the removal of cadmium present in industrial effluents

Uso cíclico de un geo polímero a base de piedra pómez para la remoción de cadmio presente en efluentes industriales

A M Montaño Angarita¹, C P González Cuervo², L M Rueda Duarte¹, and J C Gutiérrez Gallego¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

E-mail: jcgutier@uis.edu.co

Abstract. The increase in population, urbanization, technological advances, and industrial production, have generated continuous degradation of the environment derived from discharges and production of waste and by-products, such as tanneries, electroplating, metal finishes, among other, releasing wastewater with heavy metals into natural sources. These pollutants are harmful to living beings due to their persistence, prevalence, and toxicity. Consequently, new materials called geopolymers have been used, which act as adsorbents due to their high efficiency in the removal of contaminants and easy synthesis, however, the possibility of reusing them to extend their useful life has not been widely studied, because of that, various technologies have been implemented to regenerate the material and thus reuse it, such as thermal and chemical treatment, through the use of acids and high temperatures. In the present work, the cyclical use of a pumice-based geopolymeric material was evaluated, which was previously contaminated with a cadmium sulfate solution and subsequently subjected to chemical treatment with a hydrochloric acid solution to eliminate the heavy metal present. The geopolymer was synthesized following the methodology defined in previous works by the authors, after this, it was characterized by X-ray diffraction, to see the change in the structure of the precursor with respect to the synthesized material, verifying the formation of silicate networks; scanning electron microscopy where the difference in morphology between the pumice stone and the geopolymer was observed, finding for the first characteristic homogeneous surfaces and for the geopolymer agglomerates with heterogeneous surfaces. For the sorption tests, the dose of geopolymer used was 0.2 grams in contact with 25 mL of 2 ppm cadmium sulfate solution for 3 hours. For the desorption stage, 0.05 grams of contaminated geopolymer were used in contact with 25 mL of a 0.05 M solution of hydrochloric acid for 2 hours. Finally, the sorption and desorption percentages were determined in the aqueous phase using the atomic absorption technique, these measurements showed that the material presents up to four cyclical uses, maintaining adsorption percentages between 90% and 97% and desorption between 70% and 85% demonstrating that the material is suitable for adsorption-desorption processes of pollutants present in water.

Resumen. El aumento de la población, la urbanización, los avances tecnológicos y la producción industrial, han generado la degradación continua del medio ambiente derivada de descargas y producción de residuos y subproductos, como es el caso de las curtiembres, la galvanoplastia, acabados de metales, entre otras; liberando a las fuentes naturales aguas residuales con metales pesados. Estos contaminantes son perjudiciales para los seres vivos debido a su persistencia, prevalencia y toxicidad. Por lo anterior, se han empleado nuevos materiales denominados geopolímeros, los cuales actúan como adsorbentes por su alta eficiencia en la remoción de contaminantes y fácil síntesis, sin embargo, la posibilidad de reutilizarlos para alargar su vida útil no ha sido ampliamente estudiada, debido a esto, se han implementado diversas tecnologías que permitan regenerar el material y así reutilizarlos, tales como tratamiento térmico y químico, mediante el uso de ácidos y altas temperaturas. En el presente trabajo se evaluó el uso cíclico de un material geopolimérico a base de piedra pómez, el cual fue previamente contaminado con una solución de sulfato de cadmio y posteriormente sometido a tratamiento químico con una solución de ácido clorhídrico para

eliminar el metal pesado presente. El geopolímero se sintetizó siguiendo la metodología definida en trabajos previos de los autores, posterior a ello se caracterizó mediante difracción de rayos X, para ver el cambio de la estructura del precursor con respecto al material sintetizado, comprobando la formación de redes silicato; microscopia electrónica de barrido en donde se observó la diferencia de la morfología entre la piedra pómez y el geopolímero, encontrando para el primero superficies homogéneas características y para el geopolímero aglomerados con superficies heterogéneas. Para las pruebas de sorción la dosis de geopolímero utilizada fue de 0,2 gramos en contacto con 25 mL de solución 2 ppm de sulfato de cadmio durante 3 horas. Para la etapa de desorción se utilizaron 0,05 gramos de geopolímero contaminado en contacto con 25 mL de una solución 0,05 M de ácido clorhídrico durante 2 horas. Finalmente, los porcentajes de sorción y desorción fueron determinados en la fase acuosa mediante la técnica absorción atómica, estas medidas evidenciaron que el material presenta hasta cuatro usos cíclicos manteniendo porcentajes de adsorción entre 90% y 97% y de desorción entre 70% y 85%, demostrando que el material es apto para los procesos de adsorción-desorción de contaminantes presentes en aguas.

Dioxides transition metal monolayers: ab initio study

Monocapas de dióxidos de metales de transición: un estudio ab initio

M J Espitia-Rico¹, C Ortega López², and A Humanez Tobar²

¹ Universidad Distrital Francisco José Caldas, Bogotá, Colombia

² Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: angelhumaneztobar@gmail.com

Abstract. In this work, we present the results based on density functional theory study of the two-dimensional ternary alloys of transition-metal dioxides $TM_xV_{1-x}O_2$ (TM=Cr, Mo, and W for $x= 0.0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0$) in the hexagonal structure 1H. The structural and electronic properties as well as energy stability were calculated with Quantum Espresso computational code using the generalized gradient approximation with Perdew–Burke–Ernzerhof formulation. For $x=0$ and $x=1$ it was found that the lattice constants values and formations energies of VO_2 , CrO_2 , MoO_2 and WO_2 monolayers are in excellent agreement with the values reported by other authors, which guarantees the reliability of our calculations. It was found that the formations energies of all two- dimensional ternary alloys are negative, therefore the monolayers are stable energetically. In additionally, band structures and density of states studies show that $Cr_{0.25}V_{0.75}O_2$ monolayer has a half-metallic behavior with a magnetic moment of $1.00 \mu B/cell$. While the $Mo_{0.25}V_{0.75}O_2$ and $W_{0.25}V_{0.75}O_2$ monolayers exhibit a metallic behavior with magnetic moments of $0.40 \mu B/cell$ and $1.06 \mu B/cell$, respectively. The $Cr_{0.50}V_{0.50}O_2$, $Cr_{0.75}V_{0.25}O_2$, $Mo_{0.50}V_{0.50}O_2$, $Mo_{0.75}V_{0.25}O_2$, $W_{0.50}V_{0.50}O_2$ and $W_{0.75}V_{0.25}O_2$ has a metallic character with no magnetic properties. These two-dimensional ternary alloys of transition-metal dioxides are candidates for applications in different technological fields, for example, in spintronic and spin injector.

Resumen. En este trabajo presentamos los resultados del estudio basados en la teoría funcional de la densidad de las aleaciones ternarias bidimensionales de dióxidos de metales de transición $TM_xV_{1-x}O_2$ (TM=Cr, Mo y W para $x= 0,0, 0,25, 0,50, 0,75, 1,0$) en la estructura 1H. Las propiedades estructurales y electrónicas, así como la estabilidad energética, se calcularon con el código computacional Quantum Espresso utilizando la aproximación de gradiente generalizado en la formulación de Perdew-Burke-Ernzerhof. Para $x=0$ y $x=1$ se encontró que los valores de las constantes de red y las energías de formación de las monocapas de VO_2 , CrO_2 , MoO_2 y WO_2 están en excelente acuerdo con los valores reportados por otros autores, lo que garantiza la confiabilidad de nuestros cálculos. Se encontró que las energías de formación de todas las aleaciones ternarias bidimensionales son negativas. Por lo tanto, las monocapas son energéticamente estables. Además, el estudio de las estructuras de bandas y de la densidad de estados muestran que la monocapa $Cr_{0,25}V_{0,75}O_2$ posee un comportamiento semimetálico con un momento magnético de $1,00 \mu B/celda$. Mientras que las monocapas $Mo_{0,25}V_{0,75}O_2$ Y $W_{0,25}V_{0,75}O_2$ tienen un comportamiento metálico con momentos magnéticos de $0,40 \mu B/celda$ y $1,06 \mu B/celda$, respectivamente. Las monocapas $Cr_{0,50}V_{0,50}O_2$, $Cr_{0,75}V_{0,25}O_2$, $Mo_{0,50}V_{0,50}O_2$, $Mo_{0,75}V_{0,25}O_2$, $W_{0,50}V_{0,50}O_2$ and $W_{0,75}V_{0,25}O_2$ poseen un carácter metálico con ausencia de magnetismo. Estas aleaciones ternarias bidimensionales de dióxidos de metales de transición son candidatas para aplicaciones en diferentes campos tecnológicos, por ejemplo, en espintrónica e inyectores de espin.

Effect of minor addition of marble dust on the compressive strength of concrete composites

Efecto de la adición menor de polvo de mármol sobre la resistencia a la compresión de composites de hormigón

C Garcia Negrete¹, D Beltrán Guzmán¹, L Peñate Vásquez¹, J López Figueroa¹, W Montiel Cardozo¹, and K Parra-Jimenez¹

¹ Universidad del Sinu - Elias Bechara Zainum, Montería, Colombia

E-mail: korllvaryparra@unisinu.edu.co

Abstract. Marble dust, a material with a content rich in CaCO_3 , use to be produced during the processing of naturally available marble worldwide. Thus, large amount of marble dust becomes waste in many factories around the world. If this waste is discarded and accumulated, there is a potential risk of contamination for the environment. Therefore, the search for applications for waste marble dust is of great interest. In this work, the waste marble dust sample was collected from a factory located in the city of Montería, Colombia and then tested as additive in the preparation of concrete composites. An economic concrete design was proposed, with a strength of 3000 PSI, that is for general use. Once the results of the mix design were obtained, these were taken as the basis for the preparation of concrete composites with 0 %, 3 %, 7 % and 10 % of waste marble dust respect to cement content. The samples prepared were tested in compression after varied curing times. It was found that the compressive strength of composites with both 3 % and 7 % of waste marble dust was better than the corresponding one for the sample without waste marble dust addition. This improvement in the compressive strength was consistently observed after both 14 and 28 days of curing. After 14 days of curing, the compressive strength increased slightly from 23.08 ± 1.34 MPa to 25.36 ± 0.11 MPa and 25.59 ± 0.24 MPa for composites with 3 % and 7 % of waste marble dust respectively. Similarly, after 28 of curing, the compressive strengths were 25.76 ± 0.47 MPa, 28.89 ± 1.40 MPa and 27.70 ± 0.18 MPa for samples with 0 %, 3 % and 7 % of waste marble dust respectively. However, the increases in the waste marble dust content from 0 % to 10 % did not produced an improvement in the compressive strength, showing that there is a limit for the beneficial addition of waste marble dust in the concrete composites. It can be concluded that the minor addition of waste marble dust (3 % and 7 %) in concrete composites represents an application with the potential for reducing the accumulation of waste in marble factories.

Resumen. El polvo de mármol, un material con un contenido rico en CaCO_3 , suele producirse durante el procesamiento del mármol disponible de forma natural en todo el mundo. Por lo tanto, una gran cantidad de polvo de mármol se convierte en desecho en muchas fábricas de todo el mundo. Si estos residuos se desechan y acumulan, existe un riesgo potencial de contaminación para el medio ambiente. Por lo tanto, la búsqueda de aplicaciones para residuos de polvo de mármol es de gran interés. En este trabajo, la muestra de residuos de polvo de mármol fue recolectada de una fábrica ubicada en la ciudad Montería, Colombia y luego ensayada como aditivo en la preparación de composites de concreto. Se propuso un diseño de concreto económico, con la resistencia de 3000 PSI, que es para uso general. Una vez obtenido los resultados del diseño de mezcla, estos se tomaron como base para la preparación de composites de concreto con 0 %, 3 %, 7 % y 10 % de residuos de polvo de mármol respecto al contenido de cemento. Las muestras preparadas se ensayaron en compresión luego de varios tiempos de curado. Se encontró que la resistencia a la compresión de los composites con 3 % y 7 % de residuos de polvo de mármol fue mejor que la correspondiente a la muestra sin adición de residuos de polvo de mármol. Esta mejora en la resistencia a la compresión se observó consistentemente tras 14 y 28 días de curado. Tras 14 días de curado, la resistencia a la compresión aumentó ligeramente de $23,08 \pm 1,34$ MPa a $25,36 \pm 0,11$ MPa y $25,59 \pm 0,24$ MPa para composites con 3 % y 7 %

de residuos de polvo de mármol respectivamente. De igual manera, tras 28 días de curado, las resistencias a la compresión fueron de $25,76 \pm 0,47$ MPa, $28,89 \pm 1,40$, MPa y $27,70 \pm 0,18$ MPa para muestras con 0 %, 3 % and 7 % de residuos de polvo de mármol respectivamente. Sin embargo, el aumento en el contenido de residuos de polvo de mármol desde 0 % al 10 % no produjo una mejora en la resistencia a la compresión, lo que demuestra que existe un límite para la adición beneficiosa de residuos de polvo de mármol en composites de hormigón. Se puede concluir que la adición menor de residuos de polvo de mármol (3 % y 7 %) representa una aplicación con potencial para reducir la acumulación de residuos en las fábricas de mármol.

Effect of the Fe³⁺ ion substitution in the b-site on electric and magnetic properties of the novel perovskite Sr_{0.33}Sm_{0.67}Ti_{0.33}Mn_{0.67}O₃ ceramics

Efecto de la sustitución de iones Fe³⁺ en el sitio b sobre las propiedades eléctricas y magnéticas de la nueva perovskita cerámica Sr_{0.33}Sm_{0.67}Ti_{0.33}Mn_{0.67}O₃

J Roa-Rojas¹, I M Saavedra Gaona², C A Parra Vargas², J A Cuervo Farfán², and J M Cubillos Cadena²

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: jose.cubillos@uptc.edu.co

Abstract. Partial substitution of 39% in B-site cationic with Fe³⁺ ions in the new perovskite-type Sr_{0.33}Sm_{0.67}Ti_{0.33}Mn_{0.67}O₃ ceramic synthesized by the conventional solid-state reaction method, increased the sintering temperature and the unit cell volume of its orthorhombic structure (space group Pnma # 62) by 0.4%. This induced a reduction in grain size and electrical transport according to V-I measurements, where semiconductivity behavior was evidenced, with resistivity values in the linear regime for the ceramic without substitution of 51.72 ohm·cm and after the substitution of 26912.93 ohm·cm, finding variations in the thermistor-type behavior of the material. In addition, as observed in the magnetization curves as a function of the applied field and susceptibility as a function of temperature, caused a change from ferromagnetic to ferrimagnetic order with temperatures of T_c=81.32 K and T_c=65.32 K, respectively.

Resumen. La sustitución parcial del 39% en el sitio catiónico B con iones Fe³⁺ en la nueva cerámica tipo perovskita Sr_{0.33}Sm_{0.67}Ti_{0.33}Mn_{0.67}O₃ sintetizada mediante el método convencional de reacción de estado sólido, aumentó la temperatura necesaria para la sinterización, el volumen de la celda unitaria de su estructura ortorrómbica (grupo espacial Pnma # 62) en un 0,4% e indujo a la reducción del tamaño de grano y de transporte eléctrico según medidas V-I, en donde se evidenció semiconductividad, con valores de resistividad en el régimen lineal para la cerámica sin sustitución de 51,72 ohm·cm y después de la sustitución de 26912,93 ohm·cm, encontrando variaciones en el comportamiento tipo termistor del material. Además, según lo observado en las curvas de magnetización en función del campo aplicado y de susceptibilidad en función de la temperatura ocasionó un cambio de orden ferromagnético a ferrimagnético con temperaturas de T_c=81,32 K y T_c=65,32 K, respectivamente.

Effects of the substitution of transition metal atoms on the electronic properties of g-ZnO monolayer

Efectos de la sustitución de átomos de metales de transición sobre las propiedades electrónicas de la monocapa g-ZnO

G Berrio¹, J M Osorio Guillen², and C Ortega López¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

² Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

E-mail: cesarorlo@gmail.com

Abstract. This work describes the study of the structural and electronic properties of a g-ZnO monolayer with and without substitution of zinc atoms by chrome and manganese atoms. The calculations are based on the density functional theory within the generalized gradient approximation of Perdew-Burke-Ernzerhof and generalized gradient approximation with Hubbard correction, along with ultrasoft pseudopotentials and a basis of plane waves. The interface is modeled using the periodic slab scheme. In this case, a graphene-like hexagonal zinc oxide monolayer (g-ZnO-4×4) is used. The monolayer contains an empty region of 20 Å, to guarantee the periodicity of the system. The thermodynamical stability of the g-ZnO-4×4 monolayer with and without impurities is determined through the formation energy. To determine the electronic properties, the density of states, bands, and Bader or Löwdin charges are computed. The results for density of states and band structures reveal that the pristine monolayers are semiconductors and non-magnetic, while the monolayers with chrome impurities are metallic and those with manganese impurities are semi-metallic. The impurities of chrome atoms give a ferromagnetic nature to the monolayer, while the manganese impurities give a ferromagnetic or anti-ferromagnetic nature, depending on the monolayer configuration. Lastly, the Bader or Löwdin charges are calculated for the g-ZnO-4×4 monolayer with and without chrome and manganese impurities for the purpose of establishing the charge transfer.

Resumen. En este trabajo, realizamos un estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de la monocapa g-ZnO con y sustitución de átomos de zinc por átomos de cromo y manganeso. Los cálculos se realizan utilizando la teoría funcional de densidad dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof y la aproximación de gradiente generalizado con la corrección de Hubbard, junto con pseudopotenciales ultrasuaves y una base de ondas planas. La interfaz se modela utilizando el esquema del slab periódico. En este caso, se usa una monocapa de óxido de zinc hexagonal (g-ZnO-4×4). La monocapa contiene una región vacía de 20 Å, para garantizar la periodicidad del sistema. La estabilidad termodinámica de la monocapa g-ZnO-4×4 con y sin impurezas, se establece mediante la energía de formación. Para establecer las propiedades electrónicas, se determina la densidad de estados, bandas, carga Bader o Löwdin. De la densidad de estados y estructuras de banda, se observa que la monocapas prístinas son semiconductoras y no magnéticas, mientras que las monocapas con impurezas de cromo son metálicas y con impurezas de manganeso son semimetálica. Las impurezas átomos de cromo, inducen un carácter ferromagnético para la monocapa, mientras que las impurezas de manganeso inducen un carácter ferromagnético o antiferromagnético, lo cual depende de la configuración de la monocapa. Finalmente, se calcula carga Bader o Löwdin de la monocapa g-ZnO-4×4 con y sin impurezas de cromo y manganeso, para establecer la transferencia de carga.

Electronic and magnetic properties of w-BN doped with vanadium

Propiedades electrónicas y magnéticas de w-BN dopado con vanadio

G R Casiano Jiménez¹, J H Díaz-Forero², and M J Espitia-Rico²

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

² Universidad Distrital Francisco José Caldas, Bogotá, Colombia

E-mail: mespitiar@udistrital.edu.co

Abstract. We present the results of first-principles calculations carried out to investigate the structural properties and electronic structure of boron nitride in the wurtzite structure doped with vanadium atoms and with 6.25% and 12.5% concentrations. The calculation was performed using the pseudopotential method and the generalized gradient approximation in framework of the density functional theory such as implemented in the Quantum Espresso computational package. The calculated lattice parameters of w-BN are in good agreement with previous theoretical results. The analyze of band structure and the density of states reveals that $B_{0.9375}V_{0.0625}N$ and $B_{0.875}V_{0.125}N$ compounds have a half-metallic-ferromagnetic behavior being the spins up states metallic and spins states down semiconducting. We found the magnetic moment of $2.0 \mu\beta$ and $4.0 \mu\beta$ per cell, respectively. These magnetic properties come from of the hybridization of V-3d, B-2p and N-2p. These magnetic properties indicate that vanadium-doped w-BN compound can potentially be used in diluted magnetic semiconductors or as spin injectors.

Resumen. Presentamos los resultados de los cálculos de primeros principios realizados para investigar las propiedades estructurales y la estructura electrónica de nitruro de boro en la estructura de wurtzita dopada con átomos de vanadio y con concentraciones del 6,25% y 12,5%. Los cálculos se realizaron utilizando el método de pseudopotencial y la aproximación de gradiente generalizado en el marco de la teoría funcional de la densidad tal como se implementa en el paquete computacional Quantum Espresso. Los parámetros de red calculados de w-BN están en buen acuerdo con los resultados teóricos previos. El análisis de la estructura de bandas y la densidad de estados revelan que los compuestos $B_{0,9375}V_{0,0625}N$ y $B_{0,875}V_{0,125}N$ tiene un comportamiento semimetálico y ferromagnético, siendo los estados con espines arriba metálicos y los estados con espines abajo semiconductores. Encontramos que los compuestos poseen $2,0 \mu\beta$ y $4,0 \mu\beta$ por celda, respectivamente. Estas propiedades magnéticas indican que el compuesto w-BN dopado en vanadio puede usarse potencialmente en semiconductores magnéticos diluidos o como inyectores de espín.

Energetics in the growth of a graphene-like hexagonal zinc oxide monolayer on graphene substrate

Energéticos en el crecimiento de una monocapa de óxido de zinc hexagonal planar sobre el sustrato grafeno

G Berrio¹, F Peniche-Blanquicett¹, and C Ortega López¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: cesarorlo@gmail.com

Abstract. It is hard to determine the energetics involved in the interfaces of bidimensional materials only through experimental research. Fortunately, theoretical calculations can be used to study and assess thermodynamical stability, structural stability of stacking patterns, interfacial bond strength and stability of interfacial geometry using energy formation, binding energy, adhesion work and interfacial energy, respectively. This work discusses the study of energetics involved in the growth of a graphene-like hexagonal zinc oxide monolayer on graphene substrate (g-ZnO/graphene). The calculations are based on density functional theory within the generalized gradient approximation of Perdew-Burke-Ernzerhof along with ultrasoft pseudopotentials and a plane wave basis as seen in the Quantum-Espresso package. The interface is modeled using the supercell scheme or periodic slab. A g-ZnO monolayer is coupled to a graphene monolayer with a mismatch below 3%. In this case, the graphene is only used as a substrate for the zinc oxide monolayer. To meet the coupling condition, the reconstructions g-ZnO 2×2/graphene $\sqrt{7}\times\sqrt{7}$ and g-ZnO 3×3/graphene 4×4 are chosen. The formation energy values, binding energy, adhesion energy, and interfacial energy are computed for both reconstructions of the g-ZnO/graphene interface, finding that both reconstructions are energetic and thermodynamically stable. Hence, graphene is a proper substrate for the g-ZnO monolayer.

Resumen. Aun es difícil establecer los energéticos involucrados en las interfaces de materiales bidimensionales solo a través de la investigación experimental. Afortunadamente, se pueden utilizar cálculos teóricos para investigar y evaluar la estabilidad termodinámica, estabilidad estructural de los patrones de apilamiento, fuerza de enlace interfacial y estabilidad de la geometría interfacial de la interfaz a través de la energía de formación, la energía de enlace, el trabajo de adhesión y la energía interfacial de la interfaz, respectivamente. En este trabajo, se realiza un estudio de los energéticos involucrados en el crecimiento de una monocapa de óxido de zinc hexagonal planar sobre el sustrato grafeno. Los cálculos se realizan utilizando la teoría funcional de densidad dentro de la aproximación de gradiente generalizado de Perdew-Burke-Ernzerhof junto con pseudopotenciales ultrasuaves y una base de ondas planas como se implementa en el paquete Quantum-Espresso. La interfaz se modela utilizando el esquema de supercelda o de slab periódico. Una monocapa de g-ZnO se acopla a una monocapa de grafeno con un desajuste menor al 3%. En este caso, el grafeno solo se usa como un sustrato para la monocapa de óxido de zinc. Para satisfacer la condición del acople, se escogen las reconstrucciones g-ZnO 2×2/grafeno $\sqrt{7}\times\sqrt{7}$ y g-ZnO 3×3/grafeno 4×4. Se calculan los valores de la energía de formación, energía de enlace, trabajo de adhesión y energía interfacial para las dos reconstrucciones de la interfaz g-ZnO/grafeno, encontrándose que ambas reconstrucciones son energética y termodinámicamente estables y por tanto se establece que el grafeno es un buen sustrato para la monocapa g-ZnO.

Evaluation of the effect of a thermosetting coating of polyurethane resin and graphene oxide on physicochemical and mechanical properties of cementitious matrices

Evaluación del efecto de un recubrimiento termoestable de resina de poliuretano y óxido de grafeno sobre propiedades fisicoquímicas y mecánicas de matrices cementicias

G A Díaz Ramírez¹, E Mejía Ospino¹, N Gutiérrez Niño¹, J M Saavedra Sáenz¹, R Cruz¹, D P Forero Castro¹, and L M Ballesteros Rueda¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: luzmabal@uis.edu.co

Abstract. Concrete structures are structural elements made of cement, aggregates (sand, gravel, crushed stone), and admixtures. Among the best-known are reinforced concrete structures, which contain steel bars as reinforcement. As a consequence of the agents to which the structures are exposed, corrosion is generated in the concrete bars, which over time, causes fissures and cracks. The prevention of these signs of deterioration can be addressed through coatings, which according to their nature, provide new properties or improve the existing ones. The present research aims to evaluate the effect of a polyurethane resin and graphene oxide coating on a cementitious matrix's physicochemical and mechanical properties. The methodology used comprised two phases: the first consisted of establishing a protocol for applying the resin on the cementitious matrix by comparing three application methods. In the second stage, the influence of the coating on the interfacial adhesion and permeability properties of the matrix was estimated by means of sessile drop, pull-off, and degradation tests (by immersion in aggressive environments). The evaluation of each test was performed on cylindrical concrete coupons of 5.08 cm in diameter and 3.81 cm high, which were manually coated. This procedure was performed by depositing different amounts of coating as layers using a fully coated sponge. The contact angle tests for the coated concrete element showed that the use of polyurethane resin and graphene gives a hydrophobic character to the system after 3 layers of coating, as for the measurements taken for the systems with two layers, a significant change was evidenced with respect to the system without layers, this last-mentioned system absorbs the water drop in greater quantity and in less time, that is why the angle from which the drop falls is variable. The mechanical failure (obtained by pull-off tests) showed that the system initiates its breaking point or detachment inside the concrete coupon and not at the resin/concrete interface, which evidences the adhesion potential of the coating. The concrete/resin system was subjected to acidic environments to observe its effect on the deterioration time in which it was observed that the amount of material that detaches from the uncoated system when in contact with an acid solution for 30 minutes and 1 hour is significant approximately 11 grams, the opposite case happens with the 2 and 3 layer systems, these two lose weight, although they do not exceed 4 grams per system. The applicability of polyurethane resin and graphene oxide on cementitious structures shows they have great potential to improve cementitious structures' chemical and mechanical properties.

Resumen. Las estructuras de concreto son elementos estructurales constituidos por cemento, agregados (arena, grava, piedra triturada) y aditivos, entre las más conocidas están las estructuras de concreto armado, las cuales contienen barras de acero como refuerzo. Como consecuencia de los agentes a los cuales se enfrentan las estructuras se genera corrosión en las barras de concreto, lo que con el tiempo provoca fisuras y grietas. La prevención de estas señales de deterioro se puede abordar mediante el uso de recubrimientos, los cuales según su naturaleza otorgan propiedades nuevas o mejoran las existentes. El presente trabajo de investigación busca evaluar el efecto de un recubrimiento de resina de poliuretano y óxido de grafeno

(PUOG) sobre las propiedades fisicoquímicas y mecánicas de una matriz cementicia. La metodología utilizada comprendió dos fases: la primera consistió en establecer un protocolo para la aplicación de la resina sobre la matriz cementicia, mediante la comparación entre tres métodos de aplicación. En la segunda etapa se estimó la influencia del recubrimiento sobre las propiedades de adhesión interfacial y permeabilidad de la matriz, esto mediante pruebas de gota sécil, desprendimiento (pull-off) y degradación (por inmersión en ambientes agresivos). La evaluación de cada prueba se realizó sobre cupones de concreto cilíndricos de 5,08 cm de diámetro y 3,81 cm de alto, los cuales fueron recubiertos manualmente, este procedimiento se realizó depositando diferentes cantidades de recubrimiento a modo de capas utilizando una esponja recubierta en su totalidad. Las pruebas de ángulo de contacto para el elemento de concreto recubierto evidenció que el uso de la resina de poliuretano y óxido de grafeno concede un carácter hidrofóbico al sistema luego de 3 capas de recubrimiento, en cuanto a las medidas tomadas para los sistemas con dos capas, se evidenció un cambio significativo con respecto al sistema sin capas, este último sistema mencionado absorbe en mayor cantidad la gota de agua y en menor tiempo, es por esto que el ángulo desde que cae la gota es variable. La falla mecánica (obtenida mediante pruebas de pull-off) demostró que el sistema inicia su punto de quiebre o desprendimiento dentro del cupón de concreto y no en la interfase resina/concreto, lo cual evidencia el potencial de la adhesión del recubrimiento. El sistema concreto/resina se sometió a ambientes ácidos para observar su efecto en el tiempo de deterioro en el cual se observó la cantidad de material que se desprende del sistema sin recubrir al estar en contacto con una solución ácida durante 30 minutos y 1 hora es significativa aproximadamente 11 gramos, caso contrario sucede con los sistemas de 2 y 3 capas, estos dos pierden peso, aunque no sobre pasan de 4 gramos por sistema. La aplicabilidad de la resina de poliuretano y óxido de grafeno sobre estructuras cementicias demuestra que tienen un gran potencial para mejorar las propiedades químicas y mecánicas de las estructuras de cemento.

Experimental determination of the effective thermal conductivity with direct temperature measurement technique for BPGK

Determinación experimental de la conductividad térmica efectiva con técnica de medición directa de la temperatura para el BPGK

R Avella¹, A M Fernández¹, and J C Mestra¹

¹ Fundación Universitaria Los Libertadores, Bogotá, Colombia

E-mail: jcmestra@libertadores.edu.co

Abstract. In this study, we experimentally determined the thermal conductivity for different BPGK 10 films, doped with different percentages of clay using the direct temperature measurement technique. We found that the thermal delay time is a function of the power supplied to the samples. It was also found that increasing the percentage of clay increases the thermal conductivity of the films, causing a decrease in thermal resistance and therefore an increase in heat flow through the sample. Finally, the results obtained from this characterization indicate that BPGK 10 films can find applications as coatings in heat exchangers, electronic and aerospace components.

Resumen. En este estudio determinamos experimentalmente la conductividad térmica para diferentes películas de BPGK 10, dopadas con diferentes porcentajes de arcilla por medio de la técnica de medición directa de la temperatura. Encontramos que el tiempo de retraso térmico es función de la potencia suministrada a las muestras. También se encontró que, al aumentar el porcentaje de arcilla, aumenta la conductividad térmica de las películas, provocando una disminución de la resistencia térmica y por tanto un aumento del flujo de calor a través de la probeta. Por último, los resultados obtenidos mediante esta caracterización indican que las películas BPGK 10 pueden encontrar aplicaciones como recubrimientos en intercambiadores de calor, componentes electrónicos y aeroespaciales.

Influence of the synthesis pathway upon the thermoluminescent response of gadolinium aluminate matrix phosphors

Influencia de la ruta de síntesis sobre la respuesta termoluminiscente de fósforos de matriz de aluminato de gadolinio

J Zarate-Medina¹, A Alonso Sotolongo¹, and T Rivera Montalvo²

¹ Universidad Michoacana de San Nicolas de Hidalgo, Morelia, México

² Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México

E-mail: riveramt@hotmail.com

Abstract. The phosphors that present of a glow curve with a peak much more intense than the others, a sensitization to low doses and a linear relationship between the thermoluminescent response and the dose, are demanded in the dosimetry market. The gadolinium aluminate has been successfully used as host of phosphors with luminescent properties. Principally, the luminescent response of the said matrix has been improved by doping with rare earths ions. The thermoluminescent signal depends on the synthesis route, since the crystal defect density is closely connected to the pathway that the material went through to be produced. Thus, as part of the optimization process to sensitize a phosphor, it is necessary to choose the synthesis route that enhances the efficiency of its thermoluminescent mechanisms. The research herein was focused on synthesizing phosphors with stoichiometries $GdAlO_3$ and $Gd_{0.98}Dy_{0.02}AlO_3$ by three routes and determine the most recommendable to improve their thermoluminescent response. The synthesis methods were the reverse coprecipitation, where was changed the source of the Al^{3+} ions to determine how influential the raw material was, and the third was modified citrate precursor method. The phosphors yielded by reverse coprecipitation method showed the most sensitive thermoluminescent signals, mainly, the Dy^{3+} ion activated phosphor produced the most intense signal that could be related to the most suitable density and distribution of crystal defects.

Resumen. Los fósforos que presentan una curva de brillo con un pico mucho más intenso que los demás, una sensibilización a dosis bajas y una relación lineal entre la respuesta termoluminiscente y la dosis, son demandados en el mercado de la dosimetría. El aluminato de gadolinio se ha utilizado con éxito como anfitrión de fósforos con propiedades luminescentes. Principalmente, la respuesta luminescente de dicha matriz se ha mejorado dopando con iones de tierras raras. La señal termoluminiscente depende de la ruta de síntesis, ya que la densidad del defecto del cristal está estrechamente relacionada con la ruta por la que pasó el material para ser producido. Así, como parte del proceso de optimización para sensibilizar un fósforo, es necesario elegir la ruta de síntesis que mejore la eficiencia de sus mecanismos termoluminiscentes. La presente investigación se centró en sintetizar fósforos con estequiometrías $GdAlO_3$ y $Gd_{0.98}Dy_{0.02}AlO_3$ por tres rutas y determinar la más recomendable para mejorar su respuesta termoluminiscente. Los métodos de síntesis fueron la coprecipitación inversa, donde se cambió la fuente de los iones Al^{3+} para determinar qué tan influyente era la materia prima y el tercero fue el método del citrato precursor modificado. Los fósforos producidos por el método de coprecipitación inversa mostraron las señales termoluminiscentes más sensibles, principalmente, el fósforo activado por iones Dy^{3+} produjo la señal más intensa que podría relacionarse con la densidad y distribución más adecuada de los defectos del cristal.

Low cost geopolymers prepared from pumice stone and the influence of the alkaline activator in the sorption of methylene blue

Geopolímeros de bajo costo preparados a partir de piedra pómez y la influencia del activador alcalino en la sorción del azul de metileno

G C Barón Gualdrón¹, A M Montaña Angarita¹, C P González Cuervo²,
 D A Jerez Santamaria¹, and J C Gutiérrez Gallego¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

E-mail: jcgutier@uis.edu.co

Abstract. The need to find new sorbent materials that are sustainable, efficient and economically viable has drawn the attention of researchers towards geopolymers. Particularly, there is a great interest in finding precursors that provide better properties to the product and likewise, establish the most convenient synthesis parameters for their application as sorbents. Therefore, in this investigation the removal efficiency of methylene blue from synthetic aqueous solutions was determined using synthesized geopolymers based on pumice stone substituted with 10% and 15% alumina, conditions established from the results. of X-ray fluorescence of the pumice stone. Alkaline activator solutions composed of sodium silicate and sodium hydroxide in a range of concentrations were used and from the methylene blue removal tests the materials with the best performance in the removal process were determined, these being the ones synthesized with 9M concentration. These materials and their precursor were characterized by X-ray diffraction, scanning electron microscopy - energy dispersive spectroscopy, and Fourier-transform infrared spectroscopy and physisorption analysis. From X-ray diffraction, the appearance of new crystalline phases and the increase of some amorphous areas after the geopolymerization process were observed. In turn, using scanning electron microscopy - energy dispersive spectroscopy, morphological differences were established between the precursor, which presented a smooth surface, and the geopolymers, in which rough surfaces appeared, which were associated with the incorporation of aluminum in the three-dimensional structure formed, which also it was observed by changes in the bands of the Fourier-transform infrared spectroscopy spectra. Physisorption analyzes revealed the mesoporous structure of the material. Finally, the best conditions of the removal process corresponding to a pH of 10 of the methylene blue solution, 0.2 g sorbent dose, 15 ppm initial sorbate concentration and 3 hours contact time were established: observing a great influence of electrostatic interactions and phenomena such as material saturation in the removal process. The isotherms exhibited the presence of physisorption phenomena, although the kinetic models suggested that chemisorption limited the rate of the process. The results obtained show the usefulness of the material in the removal of methylene blue with removal efficiencies of up to 89.2%.

Resumen. La necesidad de encontrar nuevos materiales sorbentes que sean sostenibles, eficientes y viables económicamente ha atraído la atención de los investigadores hacia los geopolímeros. Particularmente, existe un gran interés en encontrar precursores que brinden mejores propiedades al producto y así mismo, establecer los parámetros de síntesis más convenientes para su aplicación como sorbentes. Por consiguiente, en esta investigación se determinó la eficiencia de remoción de azul de metileno de soluciones acuosas sintéticas usando geopolímeros sintetizados a base de piedra pómez sustituida con 10% y 15% de alúmina, condiciones establecidas a partir de los resultados de fluorescencia de rayos X de la piedra pómez. Se utilizaron soluciones de activador alcalino compuestas por silicato de sodio e hidróxido de sodio en un rango de concentraciones y a partir de las pruebas de remoción de azul de metileno se determinaron los materiales con mejor desempeño en el proceso de remoción, siendo estos los sintetizados con concentración 9M. Estos materiales y su precursor se caracterizaron mediante difracción de rayos-X, microscopía electrónica de

barrido-espectroscopia de energía dispersiva y espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier y análisis de fisisorción. A partir de la difracción de rayos-X se observó la aparición de nuevas fases cristalinas y el aumento de algunas áreas amorfas luego del proceso de geopolimerización. A su vez, mediante microscopía electrónica de barrido-espectroscopia de energía dispersiva se establecieron diferencias morfológicas entre el precursor, que presentó una superficie lisa, y los geopolímeros, en los cuales aparecieron superficies rugosas, que se asociaron a la incorporación de aluminio en la estructura tridimensional formada, lo cual también se observó mediante cambios en las bandas de los espectros espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier. Los análisis de fisisorción revelaron la estructura mesoporosa del material. Finalmente, se establecieron las mejores condiciones del proceso de remoción correspondientes a pH de 10 de la solución de azul de metileno, dosis de sorbente de 0,2 g, concentración inicial de sorbato de 15 ppm y tiempo de contacto 3 horas; observando una gran influencia de las interacciones electrostáticas y fenómenos como la saturación del material en el proceso de remoción. Las isothermas exhibieron la presencia de fenómenos de fisisorción, aunque los modelos cinéticos sugirieron que la quimisorción limitaba la velocidad del proceso. Los resultados obtenidos evidencian la utilidad del material en la remoción de azul de metileno con eficiencias de remoción de hasta 89,2%.

Magnetic microspheres obtained from raw iron rolling scale

Microesferas magnéticas obtenidas a partir de cascarilla de laminación de hierro en bruto

E Rivera Figueroa^{1,2}, R A Muñoz-Meneses³, L Marin-Mercado¹, J A Tabares Giraldo¹, J E Diosa¹, and E Mosquera-Vargas¹

¹ Universidad del Valle, Cali, Colombia

² Fundación Universitaria de Popayán, Popayán, Colombia

³ Universidad de Brasília, Brasília, Brazil

E-mail: edgar.mosquera@correounivalle.edu.co

Abstract. Mill scale (calamine) is a layer of oxides that forms on the surface of steel during the hot-rolled process. In addition to metal oxides and water, they usually contain other impurities such as industrial greases and oils. On average, between 35 Kg and 40 Kg of calamine are produced for every ton of rolled steel. Despite being a very interesting industrial by-product due to its high concentration of iron (~72% by weight), its reuse in new production processes is low, with most of the calamine ending up in landfills, posing a serious environmental risk due to the leaching of heavy metals into the soil. In this research, samples of mill scale provided by two Colombian steel companies were used, one of them contaminated with greases and oils, which required pre-treatment with organic solvents for cleaning. Subsequently, the materials were pulverized in a low-energy ball milling, sieved, and fluidized in a flame reactor from the propane/oxygen combustion. The obtained microparticles (with sizes between 10 μm - 90 μm) and the precursor material were characterized by infrared spectroscopy, X-ray diffraction, Mössbauer spectroscopy, and scanning electron microscopy. From the X-ray diffraction and Mössbauer spectroscopy analysis, the wustite, hematite, and magnetite phases were determined from the precursor material. After flame fluidization, X-ray diffraction, Mössbauer spectroscopy, and scanning electron microscopy showed that the starting acicular particles transform into microspheres, being the magnetite phase as the majority crystalline phase. The infrared spectroscopy measurements corroborate the presence of metal- oxide bonds associated with iron oxides. The superconducting quantum interference devices measurements were performed to determine the magnetic properties of the samples. The superconducting quantum interference devices measurements showed that the saturation magnetization and coercivity were between 84 emu/g - 94 emu/g and 22 Oe - 23 Oe, respectively. Thus, this work presents an alternative for the recovery of this by-product, being attractive in different industrial environments, in a fast and economic route.

Resumen. La cascarilla de laminación (calamina) es una capa de óxidos que se forma en la superficie del acero durante el proceso de laminado en caliente. Además de los óxidos metálicos y agua, suelen contener otras impurezas como grasas y aceites industriales. En promedio, se producen entre 35 Kg y 40 Kg de calamina por cada tonelada de acero laminado. A pesar de ser un subproducto industrial muy interesante debido a su alta concentración de hierro (~72% en peso), su reutilización en nuevos procesos productivos es baja, terminando la mayor parte de la calamina en vertederos, suponiendo un grave riesgo medioambiental debido a la lixiviación de metales pesados en el suelo. En esta investigación, se utilizaron muestras de cascarilla de laminación aportadas por dos siderúrgicas colombianas, una de ellas contaminada con grasas y aceites, que necesitó un pretratamiento con disolventes orgánicos para su limpieza. Posteriormente, las calaminas se pulverizaron en un molino de bolas de baja energía, se tamizaron, y, fueron fluidizados en un reactor de flama desde la combustión propano/oxígeno. Las micropartículas obtenidas (con tamaños entre 10 μm - 90 μm) y el material precursor fueron caracterizados mediante espectroscopía infrarroja, difracción de rayos X, espectroscopía Mössbauer, y microscopía electrónica de barrido. Del análisis de difracción de rayos X y espectroscopía Mössbauer, se determinaron las fases wustita, hematita y magnetita en el material precursor. Después a la fluidización en llama, difracción de rayos X, espectroscopía Mössbauer y

microscopía electrónica de barrido mostraron que las partículas aciculares de partida se transforman en microesferas, siendo la magnetita la fase cristalina mayoritaria. Además, la espectroscopía infrarroja corroboró la presencia del enlace metal-óxido asociados a los óxidos de hierro. Se realizaron mediciones de dispositivos superconductores de interferencia cuántica para determinar las propiedades magnéticas de las muestras. Las medidas por dispositivos superconductores de interferencia cuántica determinó que la magnetización de saturación y la coercitividad estaban entre 84 emu/g - 94 emu/g y 22 Oe - 23 Oe, respectivamente. Así, este trabajo presenta una alternativa para la valoración de este subproducto, siendo atractivo en diferentes entornos industriales, desde una ruta rápida y económica.

Optimization of the biochar generation process from coconut endocarp (*cocos nucifera*) as a potential source for the synthesis of graphene materials

Optimización del proceso de generación de bio-carbón a partir del endocarpio de coco (*cocos nucifera*) como potencial fuente para la síntesis de materiales grafénicos

A Arrieta Almarío¹, Y A Vega Vega¹, and C F Vanegas Vitola¹

¹ Universidad de Sucre, Sincelejo, Colombia

E-mail: carlos.vanegas@unisucrevirtual.edu.co

Abstract. In this study, an optimization of the biochar generation process was carried out by standardizing the predictor variables of temperature and heating time of the coconut endocarp for the extraction of vegetable graphite, seeking to maximize the performance and quality parameters. Coconut shells were collected to be crushed until fragments of approximately 1 cm were obtained, then samples of approximately 40 grams were taken. that underwent heating in an oven at different temperatures (300 °C, 400 °C, 600 °C, 800 °C and 1000 °C) and times (3 hours, 5 hours, 7 hours, and 10 hours). All trials had a warm-up time of 30 minutes. Then, each sample was weighed to calculate the yield percentage of the obtained graphite. Now, the samples that presented a yield percentage equal or greater than 50 % were macerated and sieved in a 160 µm sieve, in order to apply Fourier transform infrared spectroscopy and Raman spectroscopy for their respective characterization. Finally, a response surface analysis and its optimization were applied to the results, using the Minitab v.19.1 software. The obtained carbon was used to synthesize graphene oxide by controlled calcination. The results indicate that at temperatures less than or equal to 300 °C, some components of the coconut endocarp such as lignin, cellulose and hemicellulose, calcination was incomplete. At temperatures above 300 °C, if such a process could be evidenced. However, the analysis of the response surface showed that both temperature and time have a certain influence on the quality and performance parameters, since these variables decrease the organization degree between the bonds of the carbon atoms present in the material vegetable graphite obtained. The obtained product was used for the synthesis of graphene oxide, which was characterized by Fourier transform infrared spectroscopy and Raman spectroscopy. From infrared spectroscopy, the presence of functional groups associated with graphene oxide is evidenced, likewise, the Raman spectrum showed the characteristic peaks of said product. The variables temperature and time delay resulting in the yield and quality for synthesis of vegetable graphite based on agro-industrial residues from coconut endocarp. Furthermore, response surface analysis reveals that the optimal temperature and time to extract this material is 632 °C and 3 hours, respectively. Finally, the obtained graphite was able to synthesize graphene oxide through a second calcination.

Resumen. En este estudio, se realizó una optimización del proceso de generación de bio-carbón mediante la estandarización de las variables predictoras de temperatura y tiempo de calentamiento del endocarpio de coco para la extracción de grafito vegetal, buscando maximizar los parámetros de rendimiento y calidad. Se recolectaron conchas de coco para ser trituradas hasta obtener fragmentos de 1 cm aproximadamente, luego se tomaron muestras de 40 gramos aproximadamente que fueron sometidas a calentamiento en un horno a temperaturas (300 °C, 400 °C, 600 °C, 800 °C y 1000 °C) y tiempos (3 horas, 5 horas, 7 horas y 10 horas) variables. Todos los ensayos tuvieron un tiempo de precalentamiento de 30 minutos. Luego, cada muestra fue pesada para calcular el porcentaje de rendimiento del grafito obtenido. Ahora, las muestras que presentaron un porcentaje de rendimiento mayor o igual al 50 % fueron maceradas y, tamizadas en un tamiz de 160 µm, con el fin de aplicar espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier y espectroscopía

Raman para su respectiva caracterización. Finalmente, a los resultados se les aplicó un análisis de superficie de respuesta y una optimización del mismo, haciendo uso del software Minitab v.19.1. El carbón obtenido fue utilizado para sintetizar óxido de grafeno mediante calcinación controlada. Los resultados indican que, a temperaturas inferior o iguales a 300 °C, algunos componentes del endocarpio de coco como la lignina, celulosa y hemicelulosa, no lograron calcinarse por completo, en cambio, a temperaturas superiores a los 300 °C, si se pudo evidenciar tal proceso. Por otro lado, el análisis de la superficie de respuesta permitió comprobar que tanto la temperatura como el tiempo presentan cierta influencia en los parámetros de calidad y rendimiento, ya que estas variables afectan el grado de organización entre los enlaces de los átomos de carbono presentes en el grafito vegetal obtenido. Este último producto fue utilizado para la síntesis de óxido de grafeno, el cual fue caracterizado por espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier y espectroscopía Raman. A partir de espectroscopía infrarroja se evidenció la presencia de grupos funcionales asociados al óxido de grafeno, así mismo, el espectro Raman mostró los picos característicos de dicho producto. Las variables temperatura y tiempo afectan los resultados de rendimiento y calidad para la síntesis de grafito vegetal a base de residuos agroindustriales de endocarpio de coco. Además, el análisis de la superficie de respuesta reveló que la temperatura y el tiempo óptimos para extraer este material es de 632 °C y 3 horas, respectivamente. Por último, el grafito obtenido permitió sintetizar óxido de grafeno mediante una segunda calcinación.

Optimization of the synthetic method for obtaining geopolymers

Optimización del método de síntesis para la obtención de geopolímeros

A M Montaña Angarita¹, C P González Cuervo², L M Rueda Duarte¹,
 A M Chavarro Avellaneda¹, and J M Urbina¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

E-mail: giselle.baron@correo.uis.edu.co

Abstract. Due to the total CO₂ emissions of cement manufacturing industries worldwide, they represent 5% and 7% of greenhouse gas emissions due to the calcination of limestone, combustion, and transport and manufacturing operations of ordinary Portland cement. Taking into account that the socio-economic development and the exponential increase of the population have significantly increased demand for cement, as an essential material for construction, and with it, the increase in CO₂ concentrations in the atmosphere, inorganic polymers have emerged as a viable alternative to be implemented as cementitious materials since they can provide performance comparable to traditional cement with an added value and that these reduce greenhouse gas emissions, specifically CO₂ emissions generated by the cement and concrete industries by almost 80%. However, not all geopolymers have viable properties to be implemented as alternative cement. The properties of the inorganic polymer depend on the raw material; the design of the synthesis process is key for the optimization of the properties and consequent final application of the geopolymeric material. It is for this reason that the present study consists of the optimization of the method for obtaining cementitious geopolymers by implementing the industrial calamine residue produced in the Industrias metálicas asociadas IMAL S.A. Bogotá, Colombia. In this company, calamine is generated during the thermal treatment of steel. In this research, the effect of four different parameters of synthesis on the geopolymer mechanical properties was evaluated; for the solid phase, the behavior of the mechanical strength according to the solid/liquid, calamine: sand ratio was studied. In the liquid phase, the Na₂SiO₃:NaOH ratio and initial concentration of NaOH present in the alkaline solution were evaluated. Results obtained showed that calamine is a functional raw material to produce cementitious inorganic polymers through the geopolymerization technique. Geopolymeric material formed exhibits a maximum value of mechanical resistance equal to 18.04 MPa under the optimum conditions here established: solid/liquid ratio: 3.5 g/mL, Na₂SiO₃:NaOH 9:1, calamine:sand 10:0 and [NaOH]=10 M.

Resumen. En razón a las enormes emisiones de CO₂ generadas por la industria de manufactura del cemento a nivel mundial, estas representan entre el 5% y el 7% de las emisiones de gases de efecto invernadero y son causadas por la calcinación de piedra caliza, la combustión y las operaciones de fábrica y transporte del cemento Portland común. Teniendo presente que el desarrollo socio económico y el incremento exponencial de la población, ha incrementado significativamente la demanda de cemento, como material primordial para la construcción, y con ello, el incremento de las concentraciones de CO₂ en la atmósfera, los polímeros inorgánicos emergen como materiales cementantes alternativos viables toda vez que, estos exhiben un desempeño comparable al del cemento convencional con un valor agregado; esto es, reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, específicamente, atenúan la emisión de CO₂ en las industrias de concreto y cemento, en casi un 80%. Sin embargo, no todos los geopolímeros tienen propiedades viables para ser implementados como un cemento alternativo. Las propiedades de estos polímeros inorgánicos dependen de la materia prima usada para su obtención; el diseño del proceso de síntesis es clave para la optimización de las propiedades y consecuente aplicación final del material geopolimérico. Es por esta razón que este estudio consiste en la optimización del método para la obtención de geopolímeros cementantes a partir de calamina, un residuo producido en las Industrias metálicas asociadas IMAL S.A. Bogotá, Colombia. En esta fábrica,

la calamina se genera durante el tratamiento térmico del acero. En esta investigación, se evaluó el efecto de cuatro parámetros de síntesis sobre las propiedades mecánicas de los geopolímeros, así: en la fase sólida, se evaluó el comportamiento de la resistencia mecánica de acuerdo a la relación sólido/líquido, relación calamina:arena. En la fase líquida se evaluó la relación $\text{Na}_2\text{SiO}_3:\text{NaOH}$ y la concentración de NaOH presente en la solución alcalina. Los resultados obtenidos mostraron que la calamina es una materia prima funcional para producir polímeros inorgánicos cementantes a través de la geopolimerización. El material geopolimérico formado exhibe un valor máximo de resistencia mecánica de 18,04 MPa bajo las condiciones óptimas establecidas en este trabajo: relación sólido/líquido de 3,5 g/mL, $\text{Na}_2\text{SiO}_3:\text{NaOH}$ 9:1, calamina:arena 10:0 and $[\text{NaOH}]=10$ M.

Research of physico-mechanical properties of natural fabrics coated on thermosetting compounds of graphene oxide and polyurethane resin for reinforcement of textile reinforced concrete composites

Estudio de las propiedades físico-mecánicas de tejidos naturales recubiertos con compuestos termoestables de óxido de grafeno y resina de poliuretano para el reforzamiento de compuestos de concreto reforzado con textiles

G A Díaz Ramírez¹, E Mejía Ospino¹, N Gutiérrez Niño¹, R Cruz¹, V Sánchez Santana¹, D A Rojas Herrera¹, and L M Ballesteros Rueda¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: luzmabal@uis.edu.co

Abstract. Concrete is a conglomerate mixture composed of cement and aggregates with the ability to harden when dries and, due to its mechanical capabilities, is widely used in construction. It is usually reinforced with corrugated steel to improve its deformation capacity; however, its usage can become expensive in certain applications. The present research work evaluates the mechanical properties of an alternative support material for precast concrete, composed of fique covered with polyurethane resin and graphene oxide, was carried out with the objective of determining the contribution of the material to the enhancement of the mechanical characteristics of precast concrete. The methodology carried out consisted of four phases, the first phase consisted of the application of the polyurethane resin and graphene oxide coating on the fique fabric by the usage of a paint roller and the recording of our procedure, the second phase was the characterization of the reinforcement via the tensile test of the material to determine what amount of coating applied, called "layers", of the 3 levels chosen provides better tensile strength, the characterization by gravimetry of the amount of polyurethane resin and graphene oxide applied and Fourier-transform infrared spectroscopy of the characteristic vibration of the graphene oxide coating and its variation between each layer of coating. In the third phase, tensile tests were carried out on the reinforcing compound of fique fabric - concrete, to determine the tensile strength provided to the concrete by comparing four samples with reinforcement of non-coated fique fabric and coated fique fabric with the polyurethane resin and graphene oxide coating. In the fourth phase, the analysis of resistance to interfacial shear strength was done via pull-out extraction tests and the later characterization of the fractures of the pull-out tests by the usage of scanning electron microscopy, in this phase were also used 4 samples of non-coated fique fabric and fique fabric with polyurethane resin and graphene oxide coating. Considering the results obtained in phase 1 and phase 2, the behavior of the fabric with two layers of coating achieved greater surface coverage and tensile strength than the non-coated fique fabrics, due to the results, it was determined to use fabric with two layers of coating for the realization of phase 3 and phase 4. The results obtained in phase 3 (compound tensile tests) were carried out using fique fabric reinforcements with two layers of coating, achieving a maximum force of 3601 N and an average force of 2986 N were obtained, comparing with the results obtained with non-coated fique tissues, there was an increase of 26.89%. The extraction tests (Pull-out) carried out in phase 4, showed a maximum interfacial shear strength of 0.939 MPa with the two-layer coated fique fabric reinforcement. From the results obtained, it was concluded that the application requires a sufficient coating to properly cover the fabric, and it provides improvements to the tensile strength and interfacial shear strength of the fabric-cement interface. This research will open doors to new alternatives when the production of graphene oxide in industrial quantities is improved and optimized, and an effective application method of the resin is designed for an industrial scale.

Resumen. El concreto es una mezcla conglomerada compuesta de cemento y agregados con la capacidad de endurecerse al secarse, que, gracias a sus capacidades mecánicas, es ampliamente usado en la construcción. Usualmente, se refuerza con acero corrugado para mejorar su capacidad de deformación, sin embargo, su uso puede llegar a ser costoso en ciertas aplicaciones. En el presente trabajo de investigación se realizó la evaluación de las propiedades mecánicas de un material de soporte alternativo para moldeados de concretos prefabricados, compuesto de fique recubierto de resina de poliuretano y óxido de grafeno, con el objetivo de determinar el aporte del material a la mejora de las características mecánicas de los prefabricados de concreto. La metodología realizada se compuso de cuatro fases, la primera fase consistió en la aplicación uniforme del recubrimiento de poliuretano y óxido de grafeno sobre el tejido de fique por medio de un rodillo para pintura y registro de nuestro procedimiento, en la segunda fase se realizó la caracterización del refuerzo mediante la prueba de tracción del material para determinar qué cantidad de recubrimiento aplicado, denominado como “capas”, de los 3 niveles escogidos aporta mejor resistencia a la tracción, la caracterización por gravimetría de la cantidad de poliuretano y óxido de grafeno aplicada y la espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier de la vibración característica del recubrimiento de óxido de grafeno y su variación entre cada capa de fique recubierto. En la tercera fase se realizaron pruebas de tracción del compuesto refuerzo de tejido de fique -concreto, para conocer la resistencia a la tensión aportada al concreto al comparar cuatro muestras con refuerzo de tejido de fique no recubierto (también llamado “crudo” durante la investigación) y tejido de fique con el recubrimiento de poliuretano y óxido de grafeno. En la cuarta fase se realizó el análisis de resistencia al corte interfacial por medio de ensayos de extracción pull-out y caracterización de las fracturas de las pruebas de extracción pull-out por medio de microscopía electrónica de barrido, con el uso de 4 muestras de tejido de fique crudo y tejido de fique con el recubrimiento de poliuretano y óxido de grafeno. Considerando los resultados obtenidos en la fase 1 y fase 2, el comportamiento del nivel de “dos capas” logró una mayor cobertura de la superficie y resistencia a la tracción que los tejidos de fique no recubiertos, por tanto, se determinó utilizar refuerzos de tejido de fique del nivel de “dos capas” para la realización de la fase 3 y fase 4. Los resultados obtenidos en la fase 3 (pruebas de tracción compuesta) realizadas con refuerzos de tejido de fique del “dos capas”, se obtuvo una fuerza máxima de 3601 N y una fuerza promedio de 2986 N, comparando con los resultados obtenidos con los tejidos de fique crudo, hubo un incremento del 26,89%. Las pruebas de extracción pull-out realizadas en la fase 4, mostraron una resistencia al corte interfacial máxima de 0,939 MPa con el refuerzo de tejido de fique del nivel de “dos capas”. A partir de los resultados obtenidos, se concluyó que la aplicación requiere de un recubrimiento suficiente para cubrir el tejido adecuadamente, y provee de mejoras a la resistencia a la tracción y resistencia al corte interfacial de la interfaz fibra-cemento. Esta investigación abre las puertas a nuevas alternativas en cuanto se mejore y optimice la producción del óxido de grafeno en cantidades industriales, y se diseñe un método de aplicación eficaz a escala industrial de la resina.

Rice husk as a sustainable source for the synthesis of graphene oxide

Cascarilla de arroz como fuente sustentable para la síntesis de óxido de grafeno

A Arrieta Almario¹, Y A Vega Vega¹, and D P Morales Escobar¹

¹ Universidad de Sucre, Sincelejo, Colombia

E-mail: paolaescobar21@hotmail.com

Abstract. The purpose of this work was to synthesize graphene oxide from rice husk, in turn optimizing the variables temperature and time, to maximize the yield and quality of the carbon. Rice husks from the region were collected, washed with water, and subsequently dried at 60 °C for 24 hours. Then, an experimental design was carried out to find both the temperature and the optimal heating time of the rice husk in the oven, in which approximately 20 grams of rice husk were weighed and heated in a muffle at different temperatures (300 °C, 400 °C, and 500 °C) and times (0.5 hours, 1.0 hours, 2.0 hours and 3.0 hours). Once the different tests were carried out, each one of the samples was weighed to calculate the yield percentage of the graphite obtained. The samples that presented a yield percentage equal to or greater than 50% were macerated and sieved in a 160 µm sieve to then characterize the obtained graphite by Fourier transform infrared spectroscopy. Finally, the results were statistically analyzed with the Minitab v.19.1 software to set the optimum values for temperature and time. Now, with the graphite obtained, graphene oxide was synthesized using the modified Hummers' method, using sodium nitrate, sulfuric acid, and potassium permanganate as the main reagents of the process. Finally, graphene oxide was characterized by Fourier transform infrared spectroscopy. The optimization indicated that the best performance and quality of the graphite is obtained at a temperature of 300 °C for 0.5 hours, since as the temperature and time increase, there is a greater mass loss due to thermal decomposition. Likewise, the internal part of the husk experiences a higher temperature compared to other parts of it, preventing the organic component from being completely calcined. At the lowest temperatures and times, darker shades were observed, that is, it is richer in carbon. However, as the temperature and time increased, a white hue was observed due to the presence of ash, indicating the increase of silica in the sample. The Fourier transform infrared spectrum showed a characteristic peak between 1100 cm⁻¹ and 1000 cm⁻¹ corresponding to the vibration of the Si-O-Si bonds, confirming that rice husk ash was obtained. Regarding the synthesis of graphene oxide, the added potassium permanganate reacted with sulfuric acid forming manganese heptoxide, which is a highly selective oxidizing agent on double-bonded aromatic compounds, and which has important implications in the structure of graphite and in the mechanisms reaction during oxidation and obtaining graphene oxide. For the characterization of the latter, infrared spectroscopy was used, which evidenced the presence of functional groups associated with graphene oxide. The parameters that determine the characteristics of the carbonaceous material in the combustion of rice husk are temperature and time, obtaining the maximum performance and quality at 300 °C and 0.5 hours. Therefore, it was possible to obtain graphene oxide from rice husk residues using the modified Hummers' method.

Resumen. El propósito de este trabajo fue sintetizar óxido de grafeno a partir de cascarilla de arroz, optimizando a su vez las variables temperatura y tiempo, para maximizar el rendimiento y la calidad del carbón. Primeramente, se recolectaron cascarillas de arroz provenientes de la región, se lavaron con agua y posteriormente fueron secadas a 60 °C por 24 horas. Luego, se realizó un diseño experimental con el fin de encontrar tanto la temperatura como el tiempo óptimo del calentamiento de la cascarilla de arroz en la mufla, para ello se pesaron 20 gramos aproximadamente de cascarilla de arroz y fueron sometidos a calentamiento en una mufla a diferentes temperaturas (300 °C, 400 °C y 500 °C) y tiempos (0,5 horas, 1,0 horas, 2,0 horas y 3,0 horas). Una vez realizado los diferentes ensayos, se pesaron cada una de las muestras para calcular el porcentaje de rendimiento del grafito obtenido. Las muestras que presentaron un porcentaje de rendimiento

mayor o igual al 50 % fueron maceradas y, tamizadas en un tamiz de 160 μm para luego caracterizar por espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier el grafito obtenido. Finalmente, los resultados fueron analizados estadísticamente con el software Minitab v.19.1. para establecer los valores óptimos de temperatura y tiempo. Ahora, con el grafito obtenido se sintetizó el óxido de grafeno utilizando el método de Hummers modificado, empleando nitrato de sodio, ácido sulfúrico y permanganato de potasio como principales reactivos del proceso. Por último, el óxido de grafeno fue caracterizado por espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier. La optimización indicó que el mejor rendimiento y calidad del grafito se obtiene a una temperatura de 300 °C por 0,5 horas, ya que a medida que aumenta la temperatura y tiempo, hay mayor pérdida de masa producto de la descomposición térmica. Así mismo, la parte interna de la cascarilla experimenta una temperatura más alta en comparación con otros puntos de la misma, evitando que el componente orgánico se calcine completamente. A las temperaturas y tiempos más bajos, se observaron tonalidades más oscuras, es decir, es más rica en carbono. Sin embargo, conforme se aumentó la temperatura y el tiempo, se observó una tonalidad blanca debido a la presencia de ceniza, indicando el incremento de sílice en la muestra. El espectro infrarrojo con transformada de Fourier mostró un pico característico entre 1100 cm^{-1} y 1000 cm^{-1} correspondiente a la vibración de los enlaces Si-O-Si, confirmando que se obtuvo ceniza de cascarilla de arroz. En cuanto a la síntesis del óxido de grafeno, el permanganato de potasio adicionado, reaccionó con el ácido sulfúrico formando heptóxido de manganeso, el cual es un agente oxidante muy selectivo sobre compuestos aromáticos de doble enlace, y que tiene importantes implicaciones en la estructura del grafito y en los mecanismos de reacción durante la oxidación y obtención del óxido de grafeno. Para la caracterización de este último, se utilizó espectroscopía infrarroja, la cual evidenció la presencia de grupos funcionales asociados al óxido de grafeno. Los parámetros que determinan las características del material carbonoso en la combustión de la cascarilla de arroz son la temperatura y el tiempo, obteniéndose el máximo rendimiento y calidad a 300 °C y 0,5 horas. Por otra parte, fue posible obtener óxido de grafeno a partir de residuos de cascarilla de arroz mediante el método de Hummers modificado.

Structural, compositional, morphological, optical, and magnetic response of the CaLaTiFeO_6 double perovskite

Estructura, composición, respuesta morfológica, óptica y magnética de la perovskita doble CaLaTiFeO_6

J D Avellaneda Martínez¹, J S Ibañez Sotelo¹, X A Velásquez Moya¹, C A Parra Vargas², D A Landinez Tellez¹, and J Roa-Rojas¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: jroar@unal.edu.co

Abstract. The arrival of the transistor as the basis for modern electronics and computation brought to light the potential of solid-state physics to be a big contributor to the improvement and development of new and better technologies. The Perovskite structure (ABX_3), given its naturally big spectrum of properties and the straightforwardness of its production, lies among the structures most studied by current material scientists. To increase the range of applicability of this family, the term “complex perovskite” was coined to include structures like the double perovskite (AA'BB'X_3) or more intricate materials. Considering this, device engineering and material architecture constitute an important part of the study of exotic properties and development of new technologies, such as exploiting electronic or nuclear spins as information carriers (spintronics). By designing materials that possess both semiconducting and magnetic properties the sizes of current technology could be reduced considerably. In this work we discuss the synthesis, characterization, and the study of morphological, magnetic, and optical of the double perovskite CaLaTiFeO_6 . The sample was synthesized by a regular solid-state reaction method using the high purity precursor oxide CaCO_3 , La_2O_3 , Fe_2O_3 and Ti_2O_3 . Diffractograms for different temperatures during the synthesis process and for the final sample were obtained using a PANalytical X'pert-Pro diffractometer with a copper cathode. A Rietveld Refinement using the GSAS-II software was performed on the final diffractogram, which revealed the structure to be monoclinic in nature with space group $\text{P} 1 21/n 1$ along with the structure parameters and atomic positions of the material. Use of the micrographs obtained by a TESCAN VEGA scanning electron microscope allowed us to calculate the grain size for each sintering step, where the formation and growth of the grains could be seen clearly. Along with this, the superficial composition of the material was studied with energy dispersive X-ray spectroscopy. The Reflectance and Absorbance data obtained by the Cary 5000 UV-Vis-NIR spectrophotometer, along with the Kumar method, that our sample possessed an indirect gap of energy slightly higher than that of Germanium. Measurements with a Quantum Design vibrating sample magnetometer ($50 \text{ K} < T < 350 \text{ K}$ and applied field up to 30 kOe) showed that the material was slightly ferromagnetic at room temperature and possibly presented a high Curie temperature.

Resumen. La llegada del transistor como base de la electrónica y la computación moderna puso de manifiesto el potencial de la física del estado sólido para contribuir de manera significativa a la mejora y el desarrollo de nuevas y mejores tecnologías. La estructura perovskita (ABX_3), dada su amplia gama natural de propiedades y la facilidad de su producción, se encuentra entre las estructuras más estudiadas por los científicos de materiales actuales. Para aumentar el rango de aplicabilidad de esta familia, se acuñó el término "perovskita compleja" para incluir estructuras como la perovskita doble (AA'BB'X_3) u otros materiales más intrincados. Teniendo esto en cuenta, la ingeniería de dispositivos y la arquitectura de materiales constituyen una parte importante del estudio de propiedades exóticas y el desarrollo de nuevas tecnologías, como el aprovechamiento del espín como portador de información (espintrónica). Al diseñar materiales que posean propiedades semiconductoras y magnéticas, se podría reducir considerablemente el tamaño de la tecnología actual. En este trabajo se discute la síntesis, caracterización y estudio morfológico,

magnético y óptico de la perovskita doble CaLaTiFeO_6 . La muestra fue sintetizada por un método regular de reacción en estado sólido utilizando los óxidos precursores de alta pureza CaCO_3 , La_2O_3 , Fe_2O_3 y Ti_2O_3 . Se obtuvieron difractogramas para diferentes temperaturas durante el proceso de síntesis y para la muestra final utilizando un difractómetro PANalytical X'pert-Pro con un cátodo de cobre. Se realizó un refinamiento Rietveld utilizando el software GSAS-II en el difractograma final, el cual reveló que la estructura era de naturaleza monoclinica con el grupo espacial P 1 21/n 1, junto con los parámetros de estructura y las posiciones atómicas del material. El uso de las micrografías obtenidas por un microscopio electrónico de barrido TESCAN VEGA nos permitió calcular el tamaño de grano para cada paso de sinterización, donde la formación y crecimiento de los granos se podían ver claramente. Además, se estudió la composición superficial del material con espectroscopía de rayos X por energía dispersiva. Los datos de reflectancia y absorbancia obtenidos por el espectrofotómetro Cary 5000 UV-Vis-NIR, junto con el método de Kumar, indicaron que nuestra muestra poseía una brecha indirecta de energía ligeramente superior a la del germanio. Las mediciones con un magnetómetro de muestra vibratoria Quantum Design ($50 \text{ K} < T < 350 \text{ K}$ y campo aplicado hasta 30 kOe) revelaron que la muestra posee comportamiento ferromagnético a temperatura ambiente y posiblemente presente una temperatura de Curie alta.

Structural, compositional, morphologic, and magnetic features of the $\text{RCa}_2\text{SbFe}_2\text{O}_9$ triple perovskite

Características estructurales, morfológicas y magnéticas de la triple perovskita $\text{RCa}_2\text{SbFe}_2\text{O}_9$

D A Rueda Cadavid¹, A Hernández Andrés¹, C A Parra Vargas², I M Saavedra Gaona²,
 D A Landinez Tellez¹, and J Roa-Rojas¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: jroar@unal.edu.co

Abstract. $\text{AA}'_2\text{MM}'_2\text{O}_9$ triple perovskites allow the A- and M-site cations to be varied, tripling the elemental cell in a structure in which physical properties can be tuned by the inclusion of various elements from the periodic table. When the A and A' sites are occupied by rare earth and alkaline earth cations, while M and M' by magnetic transition metals, it is possible to produce new materials with strong ferromagnetic properties at temperatures close to 300 K, making technological applications at high temperatures feasible. In this work, we report the synthesis and characterization of the triple perovskite material $\text{RCa}_2\text{SbFe}_2\text{O}_9$ (La, Sm, Eu, Gd, Dy) not yet reported in the literature. Samples were produced by the solid-state reaction method from high purity precursor powders of La_2O_3 , CaCO_3 , Sb_2O_3 and Fe_3O_4 , which were mixed in stoichiometric proportions, according to the proposed chemical formula $\text{RCa}_2\text{SbFe}_2\text{O}_9$. The crystallographic characterization was performed by X-ray diffraction experiments using a PanAlytical X'Pert PRO-MPD equipment, which uses $\text{CuK}\alpha=1.540598 \text{ \AA}$ radiation. Measurements were performed in the 2θ range between 10° and 90° , with a speed of 0.02 o/s. The analysis of the X-ray diffraction patterns was performed by Rietveld refinement through the GSAS code that allows to establish the crystallographic parameters, structural distortions, and microstructural defects. The surface and fracture morphology were studied by scanning electron microscopy by a VEGA3 TESCAN equipment and the composition was analyzed by energy dispersive spectrometry. The scanning electron microscopy micrographs evidence a strongly granular morphology and energy dispersive spectrometry spectra show that the chemical composition of the samples agrees well with the nominal values of the stoichiometric formula. Measurements of magnetization as a function of temperature and as a function of applied field were performed using a PPMS VersaLab Quantum Design SQUID, on curves of magnetic susceptibility as a function of temperature, following the zero-field cooling and field cooled procedures, as well as magnetization as a function of applied field. The results suggest the occurrence of magnetic ordering at temperatures close to 300 K and strong magnetic anisotropy components at low temperatures, due to the distorting effects of the crystalline structure.

Resumen. Los perovskitas triples $\text{AA}'_2\text{MM}'_2\text{O}_9$ permiten variar los cationes de los sitios A y M, triplicando la celda elemental de una estructura en la que las propiedades físicas pueden sintonizarse mediante la inclusión de diversos elementos de la tabla periódica. Cuando los sitios A y A' están ocupados por cationes de tierras raras y alcalinotérreos, mientras que M y M' por metales de transición magnéticos, es posible producir nuevos materiales con fuertes propiedades ferromagnéticas a temperaturas cercanas a 300 K, haciendo factibles aplicaciones tecnológicas a altas temperaturas. En este trabajo, se presenta la síntesis y caracterización del material de triple perovskita $\text{RCa}_2\text{SbFe}_2\text{O}_9$ (La, Sm, Eu, Gd, Dy) del que no ha reportado en la literatura. Las muestras se produjeron por el método de reacción en estado sólido a partir de polvos precursores de alta pureza de La_2O_3 , CaCO_3 , Sb_2O_3 y Fe_3O_4 , que se mezclaron en proporciones estequiométricas, según la fórmula química propuesta $\text{RCa}_2\text{SbFe}_2\text{O}_9$. La caracterización cristalográfica se realizó mediante experimentos de difracción de rayos X utilizando un equipo PanAlytical X'Pert PRO-MPD, que utiliza radiación $\text{CuK}\alpha=1,540598 \text{ \AA}$. Las mediciones se realizaron en el rango 2θ comprendido entre 10°

y 90° , con una velocidad de 0,02 o/s. El análisis de los patrones de difracción de rayos X se realizó mediante refinamiento de Rietveld a través del código GSAS que permite establecer los parámetros cristalográficos, distorsiones estructurales y defectos microestructurales. La morfología superficial y defectos se estudió por microscopía electrónica de barrido mediante un equipo VEGA3 TESCAN y la composición se analizó por espectrometría de energía dispersiva. Las micrografías por microscopía electrónica de barrido evidencian una morfología fuertemente granular y los espectros de espectrometría de energía dispersiva muestran que la composición química de las muestras concuerda bien con los valores nominales de la fórmula estequiométrica. Se realizaron mediciones de la magnetización en función de la temperatura y en función del campo aplicado utilizando un PPMS VersaLab Quantum Design SQUID, sobre curvas de susceptibilidad magnética en función de la temperatura, siguiendo los procedimientos zero field cooling y field cooled, así como de la magnetización en función del campo aplicado. Los resultados sugieren la aparición de ordenamiento magnético a temperaturas próximas a 300 K y fuertes componentes de anisotropía magnética a bajas temperaturas, debido a los efectos distorsionadores de la estructura cristalina.

Study of dodecylamine functionalized graphene oxide as a molecular surfactant in water/oil systems

Estudio del óxido de grafeno funcionalizado con dodecilamina como surfactante molecular en sistemas agua/aceite

G R Cepeda Marín¹, R Cabanzo Hernández¹, E Mejía Ospino¹, and B Arenas¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: brayan.arenas@correo.uis.edu.co

Abstract. Graphene oxide is a derivative of graphene obtained from the oxidation and chemical exfoliation of graphite. Its lamellar structure is mainly conformed by carbons that change from sp² hybridization (typical of graphene) to sp³ by covalent bonding with oxygen atoms coming from carbonyl, carboxyl, hydroxyl, and epoxide functional groups formed during the oxidation process (Dimiev & Tour, 2014). The presence of these functional groups randomly distributed in the basal plane and at the edges of graphene oxide gives it a hydrophilic character that favors its dispersion in polar solvents, however, graphene oxide is an amphiphilic material because it retains in its basal plane pristine graphene domains that are hydrophobic. Recently, studies have been published on the chemical functionalization of graphene oxide with alkylamines by amidation reactions with carboxylic acids at the edge of the sheets and nucleophilic substitution reactions with epoxides on the basal plane. Lin, *et al.* and Shanmugaraj, *et al.* obtained superhydrophobic graphene oxide surfaces with improved thermal stability after functionalization with octadecylamine and hexylamine (Lin, *et al.*, 2010; Shanmugaraj, *et al.*, 2013). Fei, *et al.* evaluated the emulsifying properties of hexylamine, dodecylamine and octadecylamine functionalized graphene oxide by measurements of contact angle, emulsion volume, and average droplet diameter. They showed that these properties depended on the amphiphilicity of graphene oxide, since the wettability to oil increased with increasing alkyl chain length and the functionalized graphene oxide s formed water in oil Pickering emulsions stable over a wide pH range (Fei, *et al.*, 2016). Yang, *et al.* studied the interfacial behavior of graphene oxide selectively functionalized with octylamine at a water/oil interface. They found that basal plane functionalization of graphene oxide has a greater effect on interfacial tension reduction compared to graphene oxide, edge-functionalized graphene oxide, and a traditional ionic surfactant (Yang, *et al.*, 2018). The interfacial properties of graphene oxide are fundamental to its application in many fields of science and engineering and are inevitably affected by functionalization. So far, there has been little research on these properties in dodecylamine functionalized graphene oxide. Therefore, in this work graphene oxide was synthesized by the modified Hummers method and functionalized with dodecylamine by amidation and nucleophilic substitution reactions. The obtained materials were characterized by Fourier transform infrared spectroscopy, Raman spectroscopy and thermogravimetric analysis. The dispersibility of graphene oxide and dodecylamine was evaluated in water and toluene by bottle test. The wettability of the materials was determined by measuring the material/water contact angle by the sessile drop method and the interfacial tension in toluene/material/water systems by the pendant drop method. The emulsifying properties in these systems were established and their colloidal stability in Pickering emulsions was evaluated by bottle test and Zeta potential at different pH. Fourier transform infrared spectroscopy and Raman spectroscopy confirmed the synthesis and covalent functionalization of graphene oxide by amidation and nucleophilic substitution reactions. Thermogravimetric analysis revealed that dodecylamine has a higher thermal stability. Bottle tests and contact angle measurements showed that graphene oxide functionalization increases its hydrophobic character and therefore its dispersibility in toluene. Interfacial tension and Zeta potential measurements showed that dodecylamine can act as a molecular surfactant at the water/toluene interface reducing the interfacial tension and forming stable Pickering emulsions at pH 2, 7, and 10.

Resumen. El óxido de grafeno (GO) es un derivado del grafeno obtenido a partir de la oxidación y exfoliación química del grafito. Su estructura laminar está conformada principalmente por carbonos que cambian de hibridación sp^2 (propia del grafeno) a sp^3 por la unión covalente con átomos de oxígeno provenientes de grupos funcionales carbonilo, carboxilo, hidroxilo y epóxido formados durante el proceso de oxidación (Dimiev & Tour, 2014). La presencia de estos grupos funcionales distribuidos aleatoriamente en el plano basal y en los bordes del óxido de grafeno le confieren un carácter hidrofílico que favorece su dispersión en solventes polares, sin embargo, el óxido de grafeno es un material anfifílico porque conserva en su plano basal dominios prístinos del grafeno que son hidrofóbicos. Recientemente, se han publicado estudios sobre la funcionalización química del óxido de grafeno con alquilaminas mediante reacciones de amidación con los ácidos carboxílicos en los bordes de la hoja y reacciones de sustitución nucleofílica con los epóxidos del plano basal. Lin, *et al.* y Shanmugharaj, *et al.* obtuvieron superficies superhidrofóbicas de óxido de grafeno con una mejora en la estabilidad térmica después de funcionalizarlo con octadecilamina y hexilamina (Lin, *et al.*, 2010; Shanmugharaj, *et al.*, 2013). Fei, *et al.* evaluaron las propiedades emulsificantes del óxido de grafeno funcionalizado con hexilamina, dodecilamina y octadecilamina mediante medidas de ángulo de contacto, volumen de emulsión y diámetro promedio de la gota. Demostraron que estas propiedades dependen de la anfifilicidad del óxido de grafeno, ya que la mojabilidad al aceite aumentó con el aumento de la longitud de la cadena alquílica y los óxido de grafeno funcionalizados formaron emulsiones Pickering de agua en aceite estables en un amplio rango de pH (Fei, *et al.*, 2016). Yang, *et al.* estudiaron el comportamiento interfacial del óxido de grafeno funcionalizado selectivamente con octilamina en una interfase agua/aceite. Descubrieron que la funcionalización del óxido de grafeno en el plano basal tiene un mayor efecto en la reducción de la tensión interfacial en comparación con el óxido de grafeno, el óxido de grafeno funcionalizado en los bordes y un tensoactivo iónico tradicional (Yang, *et al.*, 2018). Las propiedades interfaciales del óxido de grafeno son fundamentales para su aplicación en muchos campos de la ciencia e ingeniería e inevitablemente se ven afectadas por la funcionalización. Hasta ahora, ha sido poca la investigación sobre estas propiedades en el óxido de grafeno funcionalizado con dodecilamina. Por lo tanto, en este trabajo se sintetizó óxido de grafeno por el método Hummers modificado y se funcionalizó con dodecilamina mediante reacciones de amidación y sustitución nucleofílica. Los materiales obtenidos se caracterizaron por espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier, espectroscopía Raman y análisis termogravimétrico. La dispersabilidad del óxido de grafeno y de la dodecilamina se evaluó en agua y en tolueno mediante la prueba de botellas. Se determinó la mojabilidad de los materiales midiendo el ángulo de contacto material/agua por el método de la gota sésil y la tensión interfacial en sistemas tolueno/material/agua por el método de la gota colgante. Se establecieron las propiedades emulsificantes en estos sistemas y se evaluó su estabilidad coloidal en emulsiones Pickering mediante la prueba de botellas y el potencial Zeta a diferentes pH. La espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier y la espectroscopía Raman confirmaron la síntesis y funcionalización covalente del óxido de grafeno por reacciones de amidación y sustitución nucleofílica. El análisis termogravimétrico reveló que la dodecilamina tiene una mayor estabilidad térmica. La prueba de botellas y las mediciones del ángulo de contacto mostraron que la funcionalización del óxido de grafeno aumenta su carácter hidrófobo y, por lo tanto, su dispersabilidad en tolueno. Las medidas de tensión interfacial y potencial Zeta mostraron que la dodecilamina puede actuar como un surfactante molecular en la interfase agua/tolueno reduciendo la tensión interfacial y formando emulsiones Pickering estables a pH 2, 7 y 10.

Study of the bidimensional heterostructure of graphene/g-AlN in the framework of density functional theory

Estudio de la heteroestructura bidimensional de grafeno/g-AlN en el marco de la teoría funcional de la densidad

J F Murillo García¹, A E Vargas Oviedo¹, C Ortega López¹, and G Berrio¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: gberrioc@gmail.com

Abstract. By means of a first principles study, in the framework of density functional theory, using the generalized gradient approximation, implemented in Quantum Espresso computational package, a graphene/g-AlN lateral heterostructure with different concentrations has been studied. The atomic configurational transition from graphene to g-AlN, through changes in the concentrations of the graphene-like aluminium nitride compound, has resulted in changes in the semiconducting character of the material. The substitution of one hexagon of carbon atoms for another of aluminium nitride changed the semimetallicity of graphene to a semiconductor with an energy gap of 1.38 eV. As the aluminium nitride concentration increased, the changes in semiconducting behavior ranged around 0.5 eV. No surface warping was observed in the monolayer, as well as no magnetism in the material.

Resumen. Mediante un estudio de primeros principios, en el marco de la Teoría Funcional de la Densidad, usando la Aproximación de Gradiente Generalizado, implementado en paquete computacional Quantum Espresso, se ha estudiado una heteroestructura lateral grafeno/g-AlN con diferentes concentraciones. La transición configuracional atómica desde el grafeno hasta el g-AlN, mediante cambios en las concentraciones del compuesto nitruro de aluminio tipo grafeno, a plasmado cambios en el carácter semiconductor del material. La sustitución de un hexágono de átomos de carbono por otro de nitruro de aluminio cambió la semimetalicidad del grafeno por un semiconductor con una brecha de energía de 1,38 eV. Al aumentar la concentración de nitruro de aluminio, los cambios en el comportamiento semiconductor oscilaron alrededor de los 0,5 eV. No se observaron alabeos superficiales en la monocapa, como tampoco magnetismo en el material.

Two-dimensional allotropic structures of III-V binary compounds. Calculation of first principles

Estructuras bidimensionales alótropas de compuestos binarios III-V. Cálculo de primeros principios

J F Murillo Garcia¹, C Ortega López¹, A E Vargas Oviedo¹, and G Berrioc¹

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

E-mail: gberrioc@gmail.com

Abstract. By means of a first-principles study, in the framework of density functional theory, using the generalized gradient approximation, implemented in the Quantum Espresso computational package, some two-dimensional allotropies of binary MN compounds of group III-V (M=B, Al, Ga) have been characterized. The different 2D-arrays of aluminium nitride exhibit, in their lowest energy state, a semiconducting behavior, with a bandgap between 2.0 eV and 2.9 eV, approximately, without geometrical deformation in the direction perpendicular to the monolayer. In the various 2D geometries for boron nitride, the lower energy states have been characterized at pressures below 0.33 Kbar, with a convergence threshold of 10^{-3} a.u. Asymmetric deformations have been observed in the plane of the boron nitride monolayer, with no prevalence of geometrical deformation in the perpendicular direction. Structural stability at minimum pressures of 0.22 Kbar has also been obtained in the two-dimensional gallium nitride structures, with no observance of surface warping.

Resumen. Mediante un estudio de primeros principios, en el marco de la teoría funcional de la densidad, usando la aproximación de gradiente generalizado, implementado en el paquete computacional Quantum Espresso, se han caracterizado algunas alotropías bi-dimensionales de compuestos binarios MN del grupo III-V (M=B, Al, Ga). Los diferentes arreglos-2D del nitruro de aluminio exhiben, en su estado de menor energía, un comportamiento semiconductor, con un rango de banda prohibida entre 2,0 y 2,9 eV, aproximadamente, sin deformación geométrica en la dirección perpendicular a la monocapa. En las distintas geometrías 2D para el nitruro de boro, los estados de menor energía se han caracterizado con presiones menores a 0,33 Kbar, con un umbral de convergencia de 10^{-3} a.u. Se han observado deformaciones asimétricas en el plano de la monocapa de nitruro de boro, sin prevalencia de deformación geométrica en la dirección perpendicular. También se han obtenido, en las estructuras bidimensionales del nitruro de galio, estabilidad estructural con presiones mínimas de 0,22 Kbar, sin observancia de alabeos superficiales.

Plasma Applications and Technologies (PAT)

Aplicaciones del Plasma y Tecnologías (PAT)

High temperature infiltration behavior and reaction characteristics of Colima volcanic ashes on gadolinium zirconate coatings deposited by atmospheric plasma spraying

Comportamiento de infiltración a alta temperatura y características de reacción de las cenizas volcánicas de Colima sobre recubrimientos de zirconato de gadolinio depositados mediante rociado atmosférico por plasma

J Zarate-Medina¹, I F Bedoya Trujillo², J S Pérez Bedolla², M A Rivera Gil³, and J Muñoz-Saldaña²

¹ Universidad Michoacana de San Nicolas de Hidalgo, Morelia, México

² Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Querétaro, México

³ Centro de Tecnología Avanzada, Querétaro, México

E-mail: jmunoz@cinvestav.mx

Abstract. In this work, the reaction products of infiltration experiments performed on free-standing gadolinium zirconate coatings deposited by atmospheric plasma spraying with molten ashes from the active Colima volcano at 1250 °C for 1 hour, 5 hours, and 10 hours are presented and discussed. For coatings manufacture, commercial gadolinium zirconate powders, with an average particle size of 83 μm, were sprayed under the following conditions: stand a distance of 75 mm, 0.75 m/s in velocity, feeding rate of 30 g/min, 80 SCFH of hydrogen and 15 SCFH of argon as primary and secondary carrier gas flows, respectively. Characterization was performed by scanning electron microscopy, chemical composition with energy dispersive spectroscopy, grazing X-ray diffraction on grinded samples at different depths, as well as micro-Raman spectroscopy. Raman spectroscopy revealed that the bands for apatite and cubic zirconia, respectively, are present over the reaction layer, indicating that these phases recrystallize together. The gadolinium zirconate coatings exposed to Colima volcanic ashes during 1 hour, 5 hours, and 10 h presented an infiltration depth of around 26.28 μm, 30.23 μm, and 37.90 μm, respectively. Phases were identified to comprehend the infiltration kinetic on these rare-earth zirconate-based coatings.

Resumen. En este trabajo, se presentan y discuten los productos de reacción de experimentos de infiltración en recubrimientos de zirconato de gadolinio depositados por rociado atmosférico por plasma con cenizas fundidas del volcán Colima a 1250 °C durante 1 hora, 5 horas y 10 horas. En la fabricación de los recubrimientos, se pulverizaron polvos comerciales de zirconato de gadolinio con un tamaño de partícula promedio de 83 μm, bajo las siguientes condiciones: distancia de rociado de 75 mm, velocidad de 0,75 m/s, tasa de alimentación de 30 g/min, 80 SCFH de hidrogeno y 15 SCFH de argón, de flujos de gas arrastre primario y secundario, respectivamente. La caracterización se realizó mediante microscopía electrónica de barrido, composición química con espectroscopía de dispersión de energía, difracción de rayos X en condiciones de incidencia rasante en muestras desbastadas a diferentes profundidades, así como espectroscopía micro-Raman. La espectroscopía Raman reveló la presencia de bandas de apatita y la zirconia cúbica, respectivamente, las cuales están presentes la capa de reacción, lo que indica que estas fases se recrystalizan simultáneamente. Los recubrimientos de zirconato de gadolinio expuestos a cenizas volcánicas de Colima durante 1 hora, 5 horas y 10 horas presentaron una profundidad de infiltración de alrededor de 26,28 μm, 30,23 μm y 37,90 μm, respectivamente. Adicionalmente, se realizó la identificación de las fases precipitadas con el fin de comprender la cinética de infiltración de estos recubrimientos de zirconato de gadolinio.

Metal hydride films produced by hydrogen transport in a hollow cathode

Películas de hidruros metálicos producidos por transporte de hidrogeno en un cátodo hueco

S Muhl¹, and A Pérez²

¹ Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

² Unidad de Investigación y Desarrollo Tecnológico, Hospital General de México, Ciudad de México, México

E-mail: ekargy@hotmail.com

Abstract. The fabrication of thin films of polycrystalline silicon using a reversible chemical reaction was described by the group of Stan Vepřek of the University of Zurich. They reported that pieces of silicon exposed to a low-pressure high-density hydrogen plasma promoted the formation of volatile silicon hydride, this could then be transported within the reactor to a hot substrate where the decomposition of the hydride resulted in the deposition of silicon thin films. Similarly, hydrogen plasmas have also been used for chemical etching of various materials and, for example, in the case of the deposition of diamond films the preferential etching of sp² bonded carbon is of fundamental importance for the formation of diamond-like carbon. In this work we describe the chemical etching of molybdenum and tantalum by atomic hydrogen generated in a radio frequency or pulsed direct-current plasma-activated in a hollow cathode. The water-cooled cylindrical cathode was lined with the appropriate metal. The metal hydride vapor generated in the plasma flowed to quartz substrates which were maintained at temperatures greater than 300 °C. Under these conditions the metal hydride was thermal decomposed and a thin film was deposited. A special substrate heater was constructed such that the four quartz substrates used could be simultaneously exposed to the metal hydride vapor, but with each substrate at a different temperature: each approximately 20 °C less than the neighboring one. In this way, depositions under identical conditions could be carried out, but at four different temperatures. We report the deposition rate as a function of the substrate temperature and the plasma power and type applied to the hollow cathode, as well as some of the characteristics of the deposited films.

Resumen. La fabricación de películas delgadas de silicio policristalino mediante una reacción química reversible fue descrita por el grupo de Stan Vepřek de la Universidad de Zúrich; ellos informaron que las piezas de silicio expuestas a un plasma de hidrógeno de alta densidad y baja presión promovía la formación de hidruro de silicio volátil. De manera similar, los plasmas de hidrógeno también se han utilizado en el grabado químico de varios materiales y, por ejemplo, en el caso de la deposición de películas de diamante, el grabado preferencial del carbono con enlace sp² se considera de fundamental importancia para la formación de carbono tipo diamante. En este trabajo describimos el grabado químico de molibdeno y tantalio por hidrógeno atómico generado en un plasma de radiofrecuencia o de corriente directa pulsado en un cátodo hueco. El vapor de hidruro metálico generado en el plasma fluyó a sustratos de cuarzo que se mantuvieron a temperaturas superiores a 300 °C. En estas condiciones, el hidruro metálico se descompuso térmicamente y se depositó una película delgada. Se construyó un calentador de sustrato especial de modo que los cuatro sustratos de cuarzo utilizados pudieran exponerse simultáneamente al vapor de hidruro metálico, pero con cada sustrato a una temperatura diferente; cada uno aproximadamente 20 °C menos que el vecino. De esta forma, se podrían realizar deposiciones en idénticas condiciones, pero a cuatro temperaturas diferentes. Reportamos la tasa de deposición en función de la temperatura del sustrato y la potencia y el tipo de plasma aplicado al cátodo hueco, así como algunas de las características de las películas depositadas.

Renewable Energy (RE)

Energías Renovables (RE)

Application of different Reynolds-averaged Navier–Stokes $k-\omega$ models in the solution of turbulent flow problems

Aplicación de diferentes modelos de ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds $k-\omega$ en la solución de problemas de flujo turbulento

C D Barrera Díaz¹, D A Fuentes Díaz¹, J E Jaramillo Ibarra¹, and M D J Martínez Manuel¹
¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: mjmartin@uis.edu.co

Abstract. The purpose of this study is to validate the development of algorithms for solving turbulent flow problems in incompressible Newtonian fluids without thermal effects through the C++ programming language and the implementation of the finite volume method. The Reynolds-averaged Navier–Stokes equations were applied together with the transport equations of k and ω , and the Boussinesq approximation for the modeling of the Reynolds stresses and the production of k , in addition, the solution for the coupling between velocity and pressure was achieved from the semi-implicit method for pressure linked equations algorithm. The numerical results obtained from the studied turbulence models ($k-\omega$: 1988,1998,2006; $k-\omega$: SST,SST 2003 and $k-\omega$: BSL), were compared against the problems described in the literature of: Plane turbulent channel flow for Reynolds of 395 and 590 based on friction velocity [Moser, R., *et al.*, 1998]; Zero pressure gradient flat plate for Reynolds of 5×10^6 based on plate length [Wieghardt, 1951]; Backward facing step for Reynolds of 36000 based on the step height [Driver, *et al.*, 1985] y Lid-driven cavity for Reynolds of 10000 based on cavity length [Ghia, U., *et al.*, 1982], where the average error percentages obtained in the velocity, turbulent kinetic energy and friction coefficient profiles were calculated and compared given the case studied. Finally, a simulation for the Plane turbulent channel flow problem for a Reynolds of 1000 based on friction velocity was performed.

Resumen. El propósito de este estudio es validar el desarrollo de algoritmos propios para la resolución de problemas de flujo turbulento en fluidos newtonianos incompresibles sin efectos térmicos a través del lenguaje de programación C++ y la implementación del método de volúmenes finitos. Se aplicaron las ecuaciones Navier-Stokes promediadas por Reynolds en conjunto a las ecuaciones de transporte de k y ω , y la aproximación de Boussinesq para el modelamiento de los esfuerzos de Reynolds y la producción de k , además, la solución para el acoplamiento entre la velocidad y la presión se logró a partir del algoritmo del método semi-implícito para ecuaciones ligadas a la presión. Los resultados numéricos obtenidos a partir de los modelos de turbulencia estudiados ($k-\omega$: 1988,1998,2006; $k-\omega$: SST,SST 2003 y $k-\omega$: BSL), se compararon contra los problemas descritos en la literatura de: Plane turbulent channel flow para los Reynolds de 395 y 590 basados en la velocidad de fricción [Moser, R., *et al.*, 1998]; Zero pressure gradient flat plate para un Reynolds de 5×10^6 basado en el largo de la placa [Wieghardt, 1951]; Backward facing step para un Reynolds de 36000 basado en la altura del escalón [Driver, *et al.*, 1985] y Lid- driven cavity para un Reynolds de 10000 basado en la longitud de la cavidad [Ghia, U., *et al.*, 1982], en donde se calcularon los porcentajes de error promedio obtenidos en los perfiles de velocidad, energía cinética turbulenta y coeficiente de fricción dado el caso estudiado. Por último, se realizó una simulación para el problema de Plane turbulent channel flow para un Reynolds de 1000 basado en la velocidad de fricción.

Economic and energy analysis of the use of municipal solid waste for energy generation at the Universidad Industrial de Santander, Colombia

Análisis económico y energético del aprovechamiento de los residuos sólidos para la generación de energía en la Universidad Industrial de Santander, Colombia

F Ortiz Ochoa¹, and Y J Rueda Ordoñez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: yjruedao@uis.edu.co

Abstract. The disposal of waste in sanitary landfills and in the open sky is generating serious problems at the national level, the accumulation limit of the main municipal garbage dumps has collapsed, and for this reason, high-impact environmental crises have been generated, in addition to health and economic crises. The main capital cities have had to restructure their collection and disposal system due to the provisional closures, in some cases permanent, of the garbage dumps, but in most cases the solution is the same, to enable another disposal site to begin the accumulation of waste and repeat the bad process that has been carried out. The methods currently used in the attempt to obtain energy from this waste focus solely on the release of methane, generated through natural biodigestion, in some cases with chemical disintegration procedures, processes that accelerate its decomposition, but with the limitation that it is only carried out in plants suitable for this purpose, and with the same need for considerable spaces for installations. In municipal landfills, the adjustments made to contain contamination by liquid decomposition are artificial pools that in some cases prevent leachate from reaching the bedrock and filtering into the groundwater channels (aquifers), in most cases they are provisional solutions and with a very short duration in time, which is why it does not represent stability for the project, a significant measure in matters of contamination, and a guarantee of safety in matters of public health. Therefore, it is necessary to transform this waste into new products as part of a sustainable circular economy for the country. One of the proposed solutions is the conversion of this matter into energy, which is aligned with the emblematic mission of making an energy transition towards non-fossil fuels. Therefore, this work addresses the thermo-economic analysis of the use of municipal solid waste for power generation. This work proposes the production of char pellets from torrefied municipal solid waste. An energy balance is carried out to estimate the dimensions and capacity of the collection and transformation plant based on the availability of waste. The municipal solid waste processing into char-like pellets was performed using a muffle furnace (Terrigeno, model D8) and a pelletizer (Oil division Colombia, model 125). First, the sample of 9 ± 1 g was introduced in open Petri plates. Then, to evaporate the moisture, the sample was heated from 26 ± 2 °C to 106 °C at a heating rate of 10 °C/min and left for 40 minutes at the drying temperature. Afterward, for torrefaction, the Petri plates were closed and sealed to avoid oxidation and obtain a quasi-inert atmosphere, and the temperature was increased to 270 °C and left 50 minutes as residence time. Also, in this stage, the remaining moisture was removed, increased energy density, and obtained the highest possible calorific value from the charcoal present in the municipal solid waste. Thus, charcoal pellets from municipal solid waste are presented as an important alternative to taking into account energy generation.

Resumen. La disposición de residuos en rellenos sanitarios y a cielo abierto está generando graves problemas a nivel nacional, el tope de acumulación de los principales basureros municipales ha colapsado, y por esto, se han generado crisis ambientales de alto impacto, además de crisis sanitarias y económicas, las principales ciudades capitales han tenido que reestructurar su sistema de recolección y disposición por los

cierres provisionales, en algunos casos permanentes de los basureros, pero en la mayoría de los casos la solución es la misma, habilitar otro sitio de disposición para iniciar la acumulación de residuos y repetir nuevamente el mal proceso que se ha venido realizando. Los métodos utilizados actualmente en el intento por obtener energía a partir de estos residuos se centran únicamente en la liberación de metano, generado mediante biodigestión natural, en algunos casos con procedimientos de desintegración química, procesos que aceleran su descomposición, pero con la limitante de que solo se realiza en plantas adecuadas para este propósito, y con la misma necesidad de espacios considerables para las instalaciones. En los basureros municipales, las adecuaciones realizadas para contener la contaminación por descomposición líquida son piscinas artificiales que evitan en algunos casos que los lixiviados lleguen al lecho rocoso y se filtren hacia los canales de agua subterránea (acuíferos), en la mayoría de los casos son soluciones provisionales y con una duración muy corta en el tiempo, por lo cual no representa una estabilidad para el proyecto, una medida significativa en temas de contaminación, y una garantía de seguridad en temas de salud pública. Por lo anterior, se hace necesaria una transformación de estos residuos en nuevos productos como parte de una economía circular sostenible para el país. Una de las soluciones propuestas es la conversión de esta materia en energía, lo cual se alinea con la misión emblemática de hacer una transición energética hacia combustibles no fósiles. Por lo tanto, este trabajo aborda el análisis termo-económico del aprovechamiento de los residuos sólidos urbanos para la generación de energía. Este trabajo plantea la producción de pellets de carbón a partir de residuos sólidos urbanos torrefactados. Se realiza un balance energético que estima las dimensiones y la capacidad de la planta de acopio y transformación, en función de la disponibilidad de residuos. El proceso de transformar residuos sólidos urbanos en pellets de carbón se realizó utilizando un horno mufla (Terrigeno, modelo D8) y una peletizadora (División de Petróleo Colombia, modelo 125). Primero se introdujo la muestra de 9 ± 1 g en cajas Petri abiertas. Luego, para evaporar la humedad, la muestra se calentó de 26 ± 2 °C a 106 °C a una velocidad de calentamiento de 10 °C/min, y se dejó durante 40 minutos a la temperatura de secado. Posteriormente, para la torrefacción, las placas de Petri se cerraron y sellaron para evitar la oxidación y obtener una atmósfera cuasi-inerte, y se aumentó la temperatura a 270 °C y se dejó 50 minutos como tiempo de residencia. Además, en esta etapa se eliminó la humedad remanente, se incrementó la densidad energética y se obtuvo el mayor poder calorífico posible del carbón vegetal presente en los residuos sólidos urbanos. Así, los pellets de carbón vegetal a partir de residuos sólidos urbanos se presentan como una importante alternativa a tener en cuenta en la generación de energía.

Experimental thermal fatigue analysis of 316L stainless steel for application in high temperature concentrated solar power plants

Análisis experimental de fatiga térmica del acero inoxidable 316L para aplicación en plantas de energía solar concentrada de alta temperatura

B D Arias Sabogal¹, J P Flórez², and N A Nieto Garzón²

¹ Universidad de Pamplona, Pamplona, Colombia

² Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: naniegub@correo.uis.edu.co

Abstract. Renewable energies contribute to the reduction the greenhouse gases, showing as an important solution in the energy transition. In this context, central tower concentrated solar power systems are a promising alternative technology. Currently, two-phase sodium thermosiphons are being studied, aiming their use in the central receiver of a solar power tower due to their high performance as heat exchangers at high temperatures. Sodium is the working fluid of the thermosiphon, so it is important to avoid cracks in its structure. The 316L stainless steel is a material that can be used in the structure of the thermosiphon. An experimental analysis of thermal fatigue of 316L steel was carried out in order to evaluate the possible changes in the 316L steel microstructure when it is submitted to the repetitive temperature changes that occur at the central receiver due to the variable solar radiation throughout the day. An induction furnace was built to thermal fatigue 316L stainless steel samples. The induction furnace allowed that the temperature of steel samples to be quickly raised to 700 °C. Subsequently, the samples were cooled in the environment up to 500 °C. These heating and cooling processes were successively repeated for 500 cycles. Hardness and metallographic tests were performed on a 316L stainless steel sample without thermal fatigue and on three 316L stainless steel samples thermally fatigued. The results of hardness and microstructure were compared and significant changes were not observed. It is suggested further studies of thermal fatigue with a range of higher temperatures and a greater number of cycles.

Resumen. Las energías renovables contribuyen a la reducción de los gases de efecto invernadero, mostrándose como una importante solución para la transición energética. En este contexto, las plantas de energía solar concentrada de torre central se presentan como una alternativa tecnológica prometedora. Actualmente, los termosifones bifásicos de sodio están siendo estudiados, visando su utilización en el receptor central de la torre solar debido a su alto desempeño como intercambiadores de calor a altas temperaturas. El sodio es el fluido de trabajo del termosifón, por lo que es importante evitar fisuras en la estructura del mismo. El acero inoxidable 316L es un material que puede ser utilizado en la estructura del termosifón. Un análisis experimental de fatiga térmica del acero 316L fue realizado con el fin de evaluar los posibles cambios en la microestructura del acero 316L cuando es sometido a los cambios repetitivos de temperatura que se presentan en el receptor central debido a las variaciones de la radiación solar a lo largo del día. Se construyó un horno de inducción para producir la fatiga térmica en muestras de acero inoxidable 316L. El horno de inducción permitió que la temperatura de las muestras de acero se elevara rápidamente a 700 °C. Posteriormente, las muestras fueron enfriadas en condiciones ambientales hasta 500 °C. Estos procesos de calentamiento y enfriamiento se repitieron sucesivamente durante 500 ciclos. Se realizaron ensayos de dureza y metalografía en una muestra de acero inoxidable 316L sin fatiga térmica y en tres muestras de acero inoxidable 316L fatigadas térmicamente. Se compararon los resultados de dureza y microestructura y no se observaron cambios significativos. Se sugieren estudios adicionales de fatiga térmica, utilizando un intervalo de temperaturas más altas y con mayor número de ciclos.

Hydrogen production through the electrolysis process of production waters from La Cira Infantas oil field, Colombia

Producción de hidrógeno mediante el proceso de electrólisis de las aguas de producción del campo petrolero La Cira Infantas, Colombia

A Y León Bermúdez¹, M A Jiménez Caballero¹, D Y Peña Ballesteros¹, J C Guerra López¹,
 and R García Márquez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: robeengarcia@gmail.com

Abstract. The purpose of this research was to evaluate the generation of hydrogen on a laboratory scale from the electrolysis of production waters from “La Cira Infantas” field for its potential use in the industry. It is important to highlight that the parameter of the water-oil production ratio in this field is around 14; thus, it is necessary to apply efficient practices with the environment. Electrolysis tests were performed using an EC570-90 power supply and graphite electrodes. Initially, a mixed 2×3×3 experimental design was generated taking salinity concentration levels (2000 mg/L and 20000 mg/L), 3 amperage variations (100 mA -150 mA -200 mA), and 3 pH variations (4-7-10). The volume of hydrogen produced for each of the tests was measured for 15 minutes. The data obtained was recorded in the Statgraphics 18 software, therefore, the statistical parameters showed that the most important and influential variable in the proposed design was the intensity of the current, followed to a lesser extent by salt concentration. It was evidenced that the pH had an insignificant effect on the process. The results demonstrated that the use of production waters for the generation of hydrogen by electrolysis can be scaled in different production waters. Likewise, the implementation of electrolysis with alternative technologies can be considered as a sustainable energy vector, which can complement the energy required in the extraction stages and different surface activities for the oil industry.

Resumen. La presente investigación tuvo como propósito evaluar la generación de hidrógeno a escala laboratorio a partir de la electrólisis de las aguas de producción del campo La Cira Infantas para su potencial uso en la industria. Es importante destacar que el parámetro de la relación de producción agua-petróleo en este campo se encuentra alrededor de 14; por lo que, es necesario aplicar prácticas eficientes con el medio ambiente. Las pruebas de electrólisis se realizaron empleando una fuente de alimentación EC570-90 y electrodos de grafito. Inicialmente, se generó un diseño experimental mixto 2×3×3 tomando de niveles de concentración de salinidad (2000 mg/L y 20000 mg/L), 3 variaciones de amperaje (100 mA -150 mA -200 mA), y 3 variaciones de pH (4-7-10). La medición del volumen de hidrógeno producido para cada una de las pruebas se realizó durante 15 minutos. Los datos obtenidos fueron registrados en el software Statgraphics 18, por tanto, los parámetros estadísticos mostraron que la variable más importante e influyente en el diseño planteado fue la intensidad de corriente, seguido en menor proporción la concentración de sal. Se evidencio que el pH presentó un efecto poco significativo en el proceso. Los resultados demostraron que el uso de aguas de producción para la generación de hidrógeno mediante electrólisis se puede escalar en diferentes aguas de producción. Asimismo, la implementación de la electrólisis con tecnologías alternativas puede considerarse como un vector energético sostenible, que puede complementar la energía requerida en las etapas de extracción y diferentes actividades de superficie para la industria del petróleo.

Modeling, simulation, and analysis of the mechanical behavior of the blade of a vertical axis wind turbine in the Chicamocha canyon in Santander, Colombia

Modelado, simulación y análisis del comportamiento mecánico del álabe de un aerogenerador de eje vertical en el cañón del Chicamocha en Santander, Colombia

N Bayona¹, J L Chacón Velasco¹, J D Rosero Ariza¹, and G Gonzales Silva¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: german.gonzalez@correo.uis.edu.co

Abstract. In recent decades, the interest in energy harnessing and the correct use of resources in a clean and environmentally friendly way has expanded due to the global increase in energy demand. This has led to the search for the development of energy capturing machines with better design characteristics. To achieve this, it is necessary to study several materials that are easy to recycle and have low environmental impact, possessing the necessary characteristics for application in the study area. Currently, H-type Darrieus vertical axis wind turbines use synthetic or composite materials for the manufacture of their blades, which generate solid waste that is difficult to dispose of at the end of their life cycle. In this research, the use of an easily recyclable composite material called Nylon X was proposed as a solution. Nylon X is a thermoplastic polymer belonging to the family of reinforced polyamides with carbon fiber filaments. When it loses its properties, it can be reused for the manufacture of the same blades. Using the finite element method, a cumulative distribution function analysis was performed with the DUE06W200 aerodynamic profile, which according to consulted references, presents better performance in the selected study area. To do this, a blade of these wind turbines was modeled, simulating under the specific conditions of the Chicamocha Canyon. The results showed that the total deformations with the proposed material under the study conditions were minimal and that Nylon X material along with the design presents good conditions of structural resistance for the use of low-power wind energy generation in the Chicamocha Canyon in Santander, Colombia.

Resumen. En las últimas décadas, el interés por el aprovechamiento energético y el uso correcto de recursos de forma limpia y amigable con el medio ambiente ha aumentado, esto debido al incremento de demanda energética a nivel mundial, lo cual ha implementado la búsqueda del desarrollo de máquinas captadoras de energía con mejores características de diseño, para esto es necesario el estudio de diversos materiales de fácil reciclaje y bajo impacto ambiental que posean las características necesarias para la aplicación en el lugar de estudio. Actualmente los aerogeneradores de eje vertical Darrieus tipo H, utilizan materiales sintéticos o compuestos para la fabricación de sus álabes los cuales generan residuos sólidos de difícil disposición al final de su ciclo de vida. En esta investigación, como solución se plantea el uso de un material compuesto de fácil reciclaje llamado nylon X, el cual es un polímero termoplástico perteneciente a la familia de las poliamidas reforzado con filamentos de fibra de carbono el cual al perder sus propiedades se puede reutilizar para la fabricación de los mismos álabes. Utilizando el método de elementos finitos se realizó un análisis de función de distribución acumulativa, con el perfil aerodinámico DUE06W200, el cual según las referencias consultadas presenta mejor rendimiento en el lugar de estudio seleccionado, para ello, se realizó el modelado de un álabe de estos aerogeneradores, simulando en las condiciones específicas del cañón del Chicamocha. Como resultados se observa que las deformaciones totales con el material propuesto en las condiciones de estudio son pequeñas y que el material Nylon X junto con el diseño, presenta buenas condiciones de resistencia estructural para el uso de generación de energía eólica de baja potencia en el cañón del Chicamocha en Santander, Colombia.

Physical-chemical and microbial parameters relationship of domestic waste water treated by UASB reactor in biogas generation process

Relación de parámetros físico-químicos y microbianos de aguas residuales domésticas tratadas por reactor UASB en proceso de generación de biogás

A D Martínez Amariz¹, and A Mantilla Moreno¹

¹ Universidad de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: anamariamoreno@gmail.co

Abstract. Biogas is a biofuel little used in Latin America, especially in Colombia. Its generation through anaerobic processes is an environmental alternative not only as a biofuel, but also because using methane contributes to reducing greenhouse gas emissions. This work analyzes the relationship between physical-chemical and microbiological parameters that influence the generation of methane in anaerobic treatment processes such as up flow anaerobic sludge blanket of municipal wastewater. Thus, the operation of up flow anaerobic sludge blanket reactors in the metropolitan area of Bucaramanga, Colombia is initially exposed, based on a bibliometric analysis on the subject. Second, the physical-chemical-microbiological characterization is presented, carried out during the first semester of 2021, of municipal wastewater samples, taken from a wastewater treatment plant in Floridablanca, Colombia. Among the results obtained from the analysis, the determination of total and fecal coliforms, microbial consortiums in the anaerobic digestion process, together with the averages of pH, temperature, alkalinity, sediment solids with an average removal of chemical oxygen demand of 60%. Finally, it concludes with the comparison and relational analysis of the values obtained in the characterization with those found in the current literature until July 2021.

Resumen. El biogás es un biocombustible poco utilizado en América Latina, especialmente en Colombia. Su generación a través de procesos anaeróbicos es una alternativa ambiental no solo como biocombustible, sino también porque al utilizar metano se contribuye a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero. Este trabajo analiza la relación entre parámetros físico-químicos y microbiológicos que influyen en la generación de metano en procesos de tratamiento anaeróbico como el manto de lodo anaeróbico de flujo ascendente de aguas residuales municipales. Así, se expone inicialmente la operación de reactores anaerobios de manto de lodos de flujo ascendente en el área metropolitana de Bucaramanga, Colombia, a partir de un análisis bibliométrico sobre el tema. En segundo lugar, se presenta la caracterización físico-química-microbiológica, realizada durante el primer semestre de 2021, de muestras de aguas residuales municipales, tomadas de una planta de tratamiento de aguas residuales en Floridablanca, Colombia. Entre los resultados obtenidos del análisis, se destaca la determinación de coliformes totales y fecales, consorcios microbianos en el proceso de digestión anaeróbica, junto con los promedios de pH, temperatura, alcalinidad, sólidos del sedimento con una remoción de demanda química de oxígeno promedio del 60%. Finalmente, concluye con la comparación y análisis relacional de los valores obtenidos en la caracterización con los encontrados en la literatura actual hasta julio de 2021.

Flat thermosiphon welded by epoxy resin for thermal control of photovoltaic panels

Termosifón plano soldado con resina epoxi para control térmico de paneles fotovoltaicos

H G Sanchez Acevedo¹, and J P Flórez Mera¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: jpflorez@uis.edu.co

Abstract. Current processes of transition from fossil energy mix to renewable sources have brought the development of efficient devices. Photovoltaic panels are an important technology in the use of solar energy. Control of the operating temperature is one of the aspects that arouse interest in this technology. Technological solutions that allow thermal control through the rejection or use of absorbed thermal energy are currently being investigated. Flat thermosiphons are one of the solutions used for this purpose. Thermosiphons are devices that use the phase change of a working fluid to transport thermal energy with low-temperature gradients. Thermosiphons are originally formed by a hollow tube closed at both ends. The bottom section absorbs the heat and produces the evaporation of the working fluid. The generated steam flows through the internal section of the tube to the upper region where the heat is rejected, producing the condensation of the fluid again. The condensate returns to the bottom region by the action of gravity. Recent developments and applications of additive manufacturing technologies have allowed the manufacture of flat geometry thermosiphons through the joining of metal sheets by diffusion welding. However, specialized equipment and exhaustive cleaning and preparation processes do not favor its economic viability in applications such as photovoltaic panels. Other forms of union that allow the operation of thermosiphons are necessary. In this work, a flat thermosiphon using an epoxy resin for joining metal sheets is built. Performance tests of the thermosiphon built using this method are conducted on an experimental bench. Several experimental operating conditions are reproduced in order to simulate the variable thermal loads and to evaluate the sealing capacity and mechanical and thermal resistance of the epoxy resin.

Resumen. Los procesos actuales de transición de la matriz energética de origen fósil para fuentes renovables han traído consigo el desarrollo de dispositivos eficientes. Los paneles solares fotovoltaicos constituyen una importante tecnología en el aprovechamiento de la energía solar. El control de la temperatura de operación es uno de los aspectos que despierta interés en esta tecnología. Soluciones tecnológicas que permitan el control térmico mediante el rechazo o aprovechamiento de la energía térmica absorbida por los paneles son actualmente investigadas. Termosifones planos son una de las soluciones empleadas para este objetivo. Los termosifones son dispositivos que emplean el cambio de fase de un fluido de trabajo para el transporte de energía térmica con bajos gradientes de temperatura. Los termosifones son originalmente formados por un tubo hueco cerrados por ambos extremos. Una sección es encargada de absorber el calor y producir la evaporación del fluido. El vapor generado fluye por la sección interna del tubo hasta la región superior donde el calor es rechazado produciendo la condensación del fluido. El condensado retorna nuevamente hasta la región inferior por acción de la gravedad. Recientes desarrollos y aplicaciones de tecnologías de manufactura aditiva han permitido la fabricación de termosifones de geometría plana a través de la unión de láminas metálicas soldadas por difusión. Sin embargo, equipos especializados y procesos de exhaustiva limpieza y preparación no favorecen su viabilidad económica en aplicaciones como los paneles solares fotovoltaicos. Así, otras formas de unión que permitan la operación de los termosifones son necesarias. En este trabajo un termosifón plano empleando una resina epóxica para la unión de láminas de metal es construido. Pruebas de funcionamiento del termosifón construido empleando este método son conducidas en un banco experimental. Varias condiciones de operación son reproducidas considerando cargas térmicas variables para evaluar la capacidad de estanqueidad y la resistencia mecánica y térmica de la resina epóxica.

Structural Integrity (SI)

Integridad Estructural (SI)

Evaluation of equivalent stress intensity factor models under mixed mode fracture in low carbon steel

Evaluación de modelos de factor de intensidad de esfuerzo equivalente bajo modo mixto de fractura en acero de bajo carbono

E Gómez Gamboa¹, J G Diaz¹, J A Mantilla Villalobos¹, O R Bohórquez Becerra¹, and M D J Martínez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: mjmartin@uis.edu.co

Abstract. This study aims to determine the equivalent stress intensity factor (SIF) model that best fits the experimental behavior of low carbon steel under mixed mode fracture I and II. The stress intensity factor models of Tanaka, Asaro, Pook, and Richard were evaluated. The theoretical values used for comparison correspond to experimental results in a modified C(T) geometry by machining a hole in the region near the crack, subjected to fatigue loads with a load ratio of $R=0.1$. The SIF of six experimental points was compared with the values computed through the models. To analyze the prediction in the estimated number of cycles, the Paris, Paris-Erdogan, and modified Forman-Newman crack growth models were used with each equivalent stress intensity factor. It is concluded that the modified Forman-Newman model has the best prediction since the error between the calculated and experimentally recorded number of cycles is the lowest. Additionally, it was observed that Richard's equivalent stress intensity factor implies a conservative approach in the element's life, with increasing errors from -1.69% at the start of growth up to 71% at the end of the calculation.

Resumen. El estudio tiene como objetivo determinar el modelo del factor de intensidad de esfuerzo equivalente que mejor se ajuste al comportamiento experimental de un acero de bajo carbono bajo modo mixto de fractura I y II. Se evaluaron los modelos de del factor de intensidad de esfuerzo de Tanaka, Asaro, Pook y Richard. Los valores teóricos que se utilizan para la comparativa corresponden a resultados experimentales en una geometría tipo C(T) modificada por el maquinado de un agujero en la región cercana a la grieta, sometida a cargas de fatiga con una relación de cargas de $R=0,1$. Se compararon los del factor de intensidad de esfuerzo de seis puntos experimentales con los valores computados a través de los modelos. Para analizar la predicción en el número de ciclos estimados se utilizaron los modelos de crecimiento de grieta de Paris, Paris-Erdogan y modificado de Forman-Newman con cada del factor de intensidad de esfuerzo equivalente. Se concluye que el modelo con mejor predicción es el modificado de Forman-Newman dado que el error entre el número de ciclos calculados y registrados experimentalmente es el menor. Además, se observó que el del factor de intensidad de esfuerzo equivalente de Richard implica un enfoque conservativo en vida útil del elemento, con errores crecientes de -1,69% para el inicio del crecimiento hasta 71% al final del cálculo.

Evaluation of nopal on corrosion phenomena in structural steels by electrochemical evaluations

Evaluación del nopal en fenómenos de corrosión en aceros estructurales mediante pruebas electroquímicas

M G Lara Cusba¹, C G Hernández Carrillo¹, R D J Torres Gómez¹, L Mujica Roncery¹, and Y Pineda Triana¹

¹ Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: yaneth.pineda@uptc.edu.co

Abstract. Inhibitors as corrosion mechanisms have allowed to increase the integrity and durability of structural elements. When applied, they generate a slowing down of the corrosion rate. However, it is required the constitution of materials that support and contribute to the reduction of raw materials, including steel, due to the increase generated by the globalization and development of the demand of societies. This is why the present research evaluated nopal (*opuntia ficus indica*) as a natural corrosion inhibitor. The particulate material was added in different concentrations (0.0%, 0.1%, 0.5%, 1.0% and 2.0%) by weight in aqueous solution, attacking commercial samples of AISI 1020 steel, then electrochemical measurements of linear polarization resistance, Tafel polarization curves and half-cell potential were carried out. The results showed that nopal in concentrations of 1% and 2% reduces the amount of mass, along with the intensity and speed of corrosion up to 30% and 40% respectively, so that the nopal has a remarkable inhibitory power of corrosion, which allows improving the durability in structural steels.

Resumen. Los inhibidores como mecanismos de corrosión han permitido aumentar la integridad y durabilidad de elementos estructurales. Al aplicarla generan una ralentización de la velocidad de corrosión. No obstante, se requiere de la constitución de materiales que soporten y coadyuven la reducción de materias primas, entre ellas el acero, debido al aumento generado por la globalización y desarrollo de la demanda de las sociedades. Es por esto que la presente investigación evaluó el nopal (*opuntia ficus indica*) como un inhibidor natural de la corrosión. El material particulado se añadió en diferentes concentraciones (0,0%, 0,1%, 0,5%, 1,0% y 2,0%) por peso en solución acuosa, atacando muestras comerciales de acero AISI 1020, luego se realizaron mediciones electroquímicas de resistencia de polarización lineal, curvas de polarización de Tafel y potencial de media celda. Los resultados mostraron que el nopal en concentraciones de 1% y 2% reduce la cantidad de masa, junto con la intensidad y velocidad de corrosión hasta en 30% y 40% respectivamente, por lo que el nopal tiene un notable poder inhibitorio de la corrosión, lo que permite mejorar la durabilidad en aceros estructuras.

Influence of nopal (*opuntia ficus-indica*) on hydration phenomena and setting times of Colombian commercial cement

Influencia del nopal (*opuntia ficus-indica*) en los fenómenos de hidratación y tiempos de fraguado del cemento comercial colombiano

C G Hernández Carrillo¹, O J Gutiérrez Junco¹, and Y Pineda Triana¹

¹ Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: yaneth.pineda@uptc.edu.co

Abstract. Hydraulic cement is an inorganic binder of calcareous origin, used for the construction of civil engineering works; its properties are conceived based on its components, which provide adequate mechanical characteristics for construction. However, despite the contribution of these materials to human development in modernity, their production consumes large amounts of virgin raw materials, energy resources and generates greenhouse gases. Consequently, elements whose inclusion modifies their physicochemical properties are used for various applications. However, the advantages in costs, production and sustainable environmental impact of these materials are unknown. Therefore, the present investigation evaluated the effect of pulverized nopal as an additive in commercial cement mix for general use, characterized and controlled by microstructural characterization by X-ray diffraction and chemical composition. Subsequently, its effect on the hydration processes in mixtures with a water/cement ratio of 0.27, using a semi-adiabatic calorimeter, by adding nopal in proportions of 1%, 2%, 5%, a commercial additive and its comparison with a control sample (0% nopal), previously characterized the plant species and controlled its composition and structure. The results show changes in the heat of hydration and retardant effects in traditional exothermic processes by adding Nopal to the cements in amounts of 1% that produce a similar effect to the commercial retardant additive without changes in mechanical resistance. These physicochemical phenomena have been related to the changes in the crystalline phases resulting from the composition of the cement, which allowed formulating a quantitative analysis of the results obtained. Likewise, these allow to project new investigations related to establishing the changes to times after the evaluated setting times, together with the determination of nopal as a commercial additive proposal.

Resumen. El cemento hidráulico es un conglomerante inorgánico de origen calcáreo, utilizado para la construcción de obras de ingeniería civil; las propiedades se conciben en función de los componentes, los cuales brindan características mecánicas adecuadas para la construcción. Sin embargo, pese a la contribución de estos materiales al desarrollo humano en la modernidad, su producción consume grandes cantidades de materias primas vírgenes, recursos energéticos y genera gases de efecto invernadero. Por consiguiente, se emplean elementos cuya inclusión modifica sus propiedades fisicoquímicas para diversas aplicaciones. No obstante, se desconoce las ventajas en costos, producción e impacto ambiental sostenible de estos materiales. Por lo anterior, la presente investigación evaluó el efecto del Nopal pulverizado como aditivo en mezcla de cemento comercial de uso general, caracterizado y controlado mediante caracterización micro estructural por difracción de rayos X y composición química. Posteriormente su efecto en los procesos de hidratación en mezclas con relación agua/cemento de 0,27, mediante un calorímetro semi-adiabático, al adicionar nopal en proporciones del 1%, 2%, 5%, un aditivo comercial y su comparación con una muestra de control (0% de nopal), previamente caracterizada la especie vegetal y controlada su composición y estructura. Los resultados exponen cambios en el calor de hidratación y efectos retardante en los procesos exotérmicos tradicionales al adicionar nopal en los cementos en cantidades de 1% que producen un efecto similar el aditivo retardante comercial sin cambios en la resistencia mecánica. Estos fenómenos físico químicos se han relacionado con los cambios en las fases cristalinas resultantes de la composición del cemento, lo que permitió formular un análisis cuantitativo de los resultados obtenidos.

Surface Modification (Ion Implantation, Ion Nitriding, Magnetron Sputtering, Cathodic Arc, Sol-Gel, Thermal Spray) (SM)

Modificación Superficial (Implantación Iónica, Nitruración Iónica, Magnetron Sputtering, Arco Catódico, Sol-Gel, Termo Rociado) (SM)

Microstructure and mechanical properties of oxynitrided Ti₆Al₄V water collected in-flight particles from twin wire arc spraying

Microestructura y propiedades mecánicas de partículas de Ti₆Al₄V oxinitradas por proyección térmica por arco eléctrico, colectadas en agua durante el vuelo

J Muñoz-Saldaña¹, M Nango Blanco¹, and J G Sánchez Tovar¹

¹ Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Querétaro, México

E-mail: jose.sanchezt@cinvestav.mx

Abstract. The mechanism of solidification and the reaction of Ti₆Al₄V particles in flight with the surrounding atmosphere and during the formation of coatings deposited by twin wire arc spraying is complex, and there are no previous reports in the literature. This work studies the microstructure, chemical composition, and mechanical properties of Ti₆Al₄V in-flight particles melted and atomized by twin wire arc spraying using nitrogen as a carrier gas. The particles were collected in water at two stand-off distances (25 mm and 125 mm). The X-ray diffraction identified phases, and their chemical compositions were quantified by wavelength-dispersive X-ray spectroscopy analysis. Mechanical properties of hardness (H) and reduced elastic modulus (Er) were determined by nanoindentation using a sphere-conical diamond tip. The in-flight particles show the presence of α-Ti, β-Ti, TiN, and TiO₂ phases. Scanning electron microscopy observed an equiaxial and columnar dendritic microstructure on the surface and cross-section of the particles for both stand-off distances and mainly two phases were quantified: (Ti,V,Al)O_x and (Ti,V)N_x corresponding to the dendritic and interdendritic regions, respectively. The average values (H, Er) in the (Ti,V,Al)O_x and (Ti, V)N_x phases were (21.2, 250), (15.9, 208) GPa and (21.6, 249), (18.4, 206) GPa for 25 mm and 125 mm, respectively; which are significantly higher than that of the raw material (4.9, 210) GPa. The increase in hardness at higher stand-off distances is due to higher nitriding by increasing the residence time of the particles as these interact with the carrier gas during their flight.

Resumen. El mecanismo de solidificación y la reacción de las partículas de Ti₆Al₄V en vuelo con la atmósfera circundante y durante la formación de los recubrimientos depositados mediante proyección térmica por arco eléctrico es complejo y no existen trabajos previos en la literatura. En este trabajo se estudia la microestructura, composición química y propiedades mecánicas de las partículas de Ti₆Al₄V en vuelo, fundidas y atomizadas por proyección térmica por arco eléctrico utilizando nitrógeno como gas portador. Las partículas fueron colectadas en agua a dos distancias de rociado (25 mm y 125 mm). Mediante difracción de rayos X se identificaron las fases, y sus composiciones químicas se cuantificaron mediante análisis de espectroscopia de rayos X de longitud de onda dispersiva. Las propiedades mecánicas de dureza (H), y módulo elástico reducido (Er) se determinaron mediante nanoindentación utilizando una punta de diamante esfero-cónica. Las partículas en vuelo muestran la presencia de fases α-Ti, β-Ti, TiN y TiO₂. Mediante microscopía electrónica de barrido se observó una microestructura dendrítica equiaxial y columnar en la superficie y en la sección transversal de las partículas para ambas distancias de rociado, y se cuantificaron principalmente dos fases: (Ti,V,Al)O_x y (Ti,V)N_x correspondientes a las regiones dendríticas e interdendríticas, respectivamente. Los valores promedios (H, Er) en las fases (Ti,V,Al)O_x y (Ti, V)N_x fueron (21,2, 250), (15,9, 208) GPa y (21,6, 249), (18,4, 206) GPa para 25 mm y 125 mm, respectivamente; los cuales son significativamente superiores a los de la materia prima (4,9, 210) GPa. El aumento de dureza a mayor distancia de rociado se debe a una mayor nitruración al aumentar el tiempo de permanencia de las partículas al interactuar con el gas portador durante su vuelo.

Plasma-assisted nitriding of M2 steel by the AEGD technique and characterization of base and nitrided material for different times of the nitriding process

Nitruración de acero M2 asistida por plasma por la técnica AEGD y caracterización de material base y nitrurado para diferentes tiempos del proceso de nitruración

S Martínez García¹, J M González Carmona², and A Ruden Muñoz¹

¹ Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia

² Centro de Ingeniería y Desarrollo Industrial, Queretaro, Mexico

E-mail: arudenm@utp.edu.co

Abstract. M2 steel as a material used in different applications in industrial fields, since it presents interesting mechanical properties in terms of its surface hardness, resistance to fatigue and corrosion, which can be improved through surface treatments such as nitriding, for that matter. punctually, the study of its mechanical properties after its plasma nitriding assisted by the AEGD technique is proposed, where in turn it is intended to establish the change in its mechanical properties, particularly the surface hardness, by making variations in the duration of the nitriding process. In addition to the above, during the development, it is intended to evaluate the influence of the parameters associated with the plasma during the nitriding process, through non-invasive techniques such as optical emission spectroscopy and with the implementation of a probe of langmuir. In turn, different characterization techniques will be implemented such as X-ray diffraction, scanning electron microscopy, energy dispersed spectroscopy, static scratch, tribology, the above in order to determine additional variations in the M2 steel.

Resumen. El acero M2 como material utilizado en diferentes aplicaciones en ámbitos industriales, dado que presenta propiedades mecánicas interesantes en cuanto a su dureza superficial, resistencia a la fatiga y a la corrosión, que pueden ser mejoradas a partir de tratamientos superficiales como la nitruración, para el caso puntual se plantea el estudio de sus propiedades mecánicas posteriores a su nitruración por plasma asistida por la técnica AEGD, donde a su vez se pretende establecer el cambio en sus propiedades mecánicas, particularmente la dureza superficial, al realizar variaciones en la duración del proceso de nitruración. Adicional a lo anterior, se pretende durante el desarrollo, evaluar la influencia de los parámetros asociados al plasma durante el proceso de nitruración, por medio de técnicas, no invasivas como la Espectroscopia óptica por emisión y con la implementación de una sonda de Langmuir. A su vez, se implementarán diferentes técnicas de caracterización como difracción de rayos X, microscopia electrónica de barrido, espectroscopia de energía dispersada, scratch estático, tribología, lo anterior con la finalidad de determinar variaciones adicionales en el acero M2.

Study of the advances and applications of conventional flame spray in the last decade

Estudio de los avances y tendencia del rociado térmico convencional por flama en la última década

D Álvarez Flórez¹, G Becerra Abril¹, R Giannini Delgado¹, and R Ramos Hinojosa¹

¹ Universidad Católica de Santa María, Arequipa, Perú

E-mail: 71225922@ucsm.edu.pe

Abstract. Despite technological advances in the area of thermal spraying concerning new coating techniques, conventional spraying through flame is still widely used in the industry this because sometimes it is usually the best option to coat surfaces, either because it has the least cost of implementation in equipment, because it is the most commercial or because of the mechanical benefits that it has as an advantage due to its relatively low working temperatures. In this work, you can see this technique's current applications in the mining industry and biomedical, among others. As well as technical studies that deal with this technique on issues of mechanical properties or microstructural properties product of flame spraying, and it is evident that, despite the new spraying techniques, the flame spraying technique through oxycombustion justifies its current use in the industry, evidenced by more than 80 articles published in recent years. We can relate the interest in applying CFS compared to other techniques due to the ease of the process. Since it is the least complicated of all the processes, it is also a more accessible technique due to the equipment that the technique requires, which are usually less expensive. Compared to other thermal spray techniques. Recent studies that focus on improving the spraying process of this technique suggest that we are reaching "perfection", which is logical given the time it has been in service in the industry. Regarding properties that can be achieved with conventional thermal spraying by flame in applications where corrosion-resistant coatings are required, and materials such as tungsten carbide, chromium, and aluminum compounds are used. Porosity is an important characteristic in the conventional thermal flame spraying process, as it can affect thermal conductivity, corrosion resistance, and hardness. In coatings that seek to minimize residual stresses, several factors, such as impact velocity, preheat temperature, and materials' behavior, must be considered, and appropriate annealing must be performed to minimize energy differences. According to studies, conventional thermal flame spraying is, on average, 60%-70% more corrosion-resistant in anticorrosive applications.

Resumen. Pese al avance tecnológico en el área de rociado térmico respecto a nuevas técnicas de recubrimiento, el rociado convencional a través de flama sigue siendo muy utilizado en la industria, esto porque en ocasiones suele ser la mejor opción para recubrir superficies ya sea por tener el menor costo de implementación en equipos, por ser el más comercial o por las bondades mecánicas que tiene como ventaja debido a sus relativamente bajas temperaturas de trabajo. En este trabajo se puede ver las aplicaciones actuales que tiene esta técnica en la industria minera, biomédica entre otras. Así como estudios tecnológicos que tratan respecto a esta técnica en temas de propiedades mecánicas o propiedades microestructurales producto del rociado por flama y se deja en evidencia que, a pesar de las nuevas técnicas de rociado, la técnica de rociado por flama a través de oxicomustión justifica su actual uso en la industria, evidenciado por los más de 80 artículos publicados en los últimos años. Podemos relacionar el interés de aplicar RTCF frente a otras técnicas por la facilidad que lleva el proceso, puesto que es el menos complicado de todos los procesos, además es una técnica más accesible por los equipos que la técnica requiere, los cuales suelen ser menos costosos comparado a otras técnicas de rociado térmico. Estudios recientes que se enfocan en mejorar el proceso de rociado de esta técnica apuntan a que estamos alcanzando la "perfección", que es lógico por el tiempo que lleva en servicio de la industria. Respecto a propiedades que se pueden alcanzar con rociado térmico convencional por flama en aplicaciones donde se requieren recubrimientos resistentes a la corrosión

y se utilizan materiales como carburo de tungsteno, cromo y compuestos de aluminio. La porosidad es una característica importante en el proceso de rociado térmico convencional por flama, ya que puede afectar la conductividad térmica, la resistencia a la corrosión y la dureza. En recubrimientos que buscan minimizar los esfuerzos residuales, se deben tener en cuenta varios factores, como la velocidad de impacto, la temperatura de precalentamiento y el comportamiento de los materiales, y se debe realizar un recocido apropiado para minimizar las diferencias de energía. Según estudios, el rociado térmico convencional por flama es en promedio un 60%-70% más resistente a la corrosión en aplicaciones anticorrosivas.

Thin Films and Nanomaterials (TFN)

Películas Delgadas y Nanomateriales (TFN)

Composite magnetic skyrmion systems in asymmetric bilayers

Sistemas compuestos de skyrmion magnético en bicapas asimétricas

J C Pina Velásquez¹, and C C De Souza Silva¹

¹ Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Brazil

E-mail: clecio.cssilva@ufpe.br

Abstract. Skyrmions are topologically protected nanoscopic magnetic textures appearing in chiral magnetic materials under appropriate conditions. Their small size and the fact that they can be driven by very small spin-polarized currents, thus inducing low dissipation, make them promising candidates for future applications in high density magnetic storage and spintronics. However, once in motion, skyrmions are also subjected to a Magnus force, which produces a lateral motion forcing the skyrmion to eventually annihilate at the wall of, *e.g.*, a racetrack, thus never reaching the intended destiny. This oblique motion, known as the skyrmion Hall effect, has a characteristic Hall angle, which depends on microscopic parameters of the system, and a Hall sign, which depends on the topological charge of the skyrmion. Recently, it has been shown that the skyrmion Hall effect can be eliminated in a bilayer system comprising two ferromagnetic layers coupled antiferromagnetically. These skyrmions attract each other and form a pair with null total topological charge, which potentially eliminates the unwanted skyrmion Hall effect. However, the success of this idea in promoting fully longitudinal motion of skyrmions relies on a highly symmetrical configuration of the magnetic parameters of both layers. In the present work, we perform a comprehensive theoretical investigation of coupled skyrmion pairs in non-symmetric bilayers. We introduce asymmetry in the Dzyaloshinskii-Moriya interaction coefficients in the top and bottom layers and calculate, using micromagnetic simulations and semi-analytic methods, how the skyrmion-skyrmion coupling energy and the skyrmion radii evolve with increasing asymmetry. We also investigate the evolution of the Hall angle of the coupled pair as a function of the antiferromagnetic coupling between the top and bottom layers and the ratio between their Dzyaloshinskii-Moriya interaction coefficients.

Resumen. Los skyrmions son texturas magnéticas nanoscópicas topológicamente protegidas que aparecen en materiales magnéticos quirales en condiciones apropiadas. Su pequeño tamaño y el hecho de que pueden ser impulsados por corrientes polarizadas de espín muy pequeñas, lo que induce una baja disipación, los convierten en candidatos prometedores para futuras aplicaciones en almacenamiento magnético de alta densidad y espintrónica. Sin embargo, una vez en movimiento, los skyrmions también están sujetos a una fuerza de Magnus, que produce un movimiento lateral que obliga al skyrmion a aniquilarse finalmente en la pared de, por ejemplo, una pista, por lo que nunca alcanza el destino previsto. Este movimiento oblicuo, conocido como efecto Hall del skyrmion, tiene un ángulo de Hall característico, que depende de los parámetros microscópicos del sistema, y un signo de Hall, que depende de la carga topológica del skyrmion. Recientemente se ha demostrado que el efecto Hall del skyrmion puede eliminarse en un sistema bicapa formado por dos capas ferromagnéticas acopladas antiferromagnéticamente. Estos skyrmions se atraen entre sí y forman un par con carga topológica total nula, lo que potencialmente elimina el efecto Hall del skyrmion no deseado. Sin embargo, el éxito de esta idea de promover el movimiento completamente longitudinal de los skyrmions se basa en una configuración altamente simétrica de los parámetros magnéticos de ambas capas. En el presente trabajo, realizamos una investigación teórica exhaustiva de pares de skyrmion acoplados en bicapas no simétricas. Introducimos asimetría en los coeficientes de interacción Dzyaloshinskii-Moriya en las capas superior e inferior y calculamos, usando simulaciones micromagnéticas y métodos semianalíticos, cómo la energía de acoplamiento skyrmion-skyrmion y los radios de skyrmion evolucionan con una asimetría creciente. También investigamos la evolución del ángulo de Hall del par acoplado en función del acoplamiento antiferromagnético entre las capas superior e inferior y la relación entre sus coeficientes de interacción Dzyaloshinskii-Moriya.

Effect of graphene oxide magnetic nanofluids on improved oil recovery

Efecto de los nanofluidos magnéticos de óxido de grafeno en la recuperación mejorada de petróleo

N Gutiérrez Niño¹, E M Pérez Rodríguez¹, R Cabanzo Hernández¹, N Santos Santos¹, and E Mejía Ospino¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: emejia@uis.edu.co

Abstract. Heavy and extra-heavy crude oils are unconventional hydrocarbons containing a complex mixture of organic compounds, such as saturated hydrocarbons, aromatics, resins and asphaltenes. These crudes have a higher density and viscosity than conventional crudes and their chemical composition varies depending on the place of origin. In the extraction process, the viscosity and density of heavy and extra-heavy crude oils present a significant challenge, as they can clog reservoir pores and make it difficult for oil to flow to production wells. Additionally, extracting these crudes may require the use of enhanced recovery techniques such as steam injection or hydraulic fracturing, increasing costs and environmental challenges. In terms of transportation, heavy and extra-heavy crude oils have low fluidity and high viscosity, making them difficult to pump through pipelines and storage tanks. To improve their fluidity and facilitate transportation, these crudes may require the use of diluents or additives. In addition, the high wettability of some rock-fluid systems towards oil aggravates this situation. This phenomenon refers to the tendency of reservoir rocks to prefer oil over water. The high wettability of oil in the rocks reduces the flow of oil through the reservoir pores and pipelines, which decreases the recovery factor and increases operating costs. Despite the challenges, heavy and extra-heavy crude oils are an important source of hydrocarbons, and their exploitation may be economically viable in certain circumstances. However, it is also important to consider the environmental and social impacts associated with its extraction and transport, and to search ways to minimize these impacts through more sustainable practices and more advanced technologies. Considering the above, various techniques have been developed to improve the exploitation of heavy and extra-heavy crude oil. These techniques are based on the modification of the oil and/or the environment where it is found, by means of physical or chemical agents. One of the most recent and promising methods is the use of nanotechnology to create nanofluids that can improve the properties of heavy crude oil and make it easier to exploit. Nanofluids are colloidal suspensions containing nanoparticles of materials with unique magnetic, optical, rheological, or thermal properties, in a liquid medium. These nanomaterials can modify the properties of heavy crude oil and the environment in which it is found, to make it easier to extract and transport. In this sense, in the present investigation, aqueous nanofluids were synthesized from magnetite nanoparticles supported on graphene oxide, and their obtaining was determined by various characterization techniques such as X-ray diffraction, scanning electron microscopy, Fourier-transform infrared spectroscopy, dynamic light scattering, and ultraviolet-visible spectroscopy. Subsequently, its effect on the interfacial tension of the oil was evaluated, finding a significant decrease depending on the concentration of the nanofluid. Likewise, a wettability alteration test was carried out on an outcrop rock sample with an affinity to be wetted by oil, in which it was established that, after its immersion in nanofluids with different concentrations of magnetite nanoparticles supported on graphene oxide for a period of three hours, there was a decrease in its wettability to oil reflected in an increase in the value of the contact angle. The results obtained from this study indicate that the use of composite nanofluids significantly improves the reservoir conditions for crude oil exploitation, which could result into an increase in the recovery factor.

Resumen. Los petróleos crudos pesados y extrapesados son hidrocarburos no convencionales que contienen una compleja mezcla de compuestos orgánicos, como hidrocarburos saturados, aromáticos, resinas y asfáltenos. Estos crudos tienen una densidad y viscosidad mayor que los crudos convencionales y su composición química varía según el lugar de origen. En el proceso de extracción, la viscosidad y la densidad de los petróleos crudos pesados y extrapesados presentan un desafío significativo, ya que pueden obstruir los poros del reservorio y dificultar el flujo de petróleo hacia los pozos de producción. Además, la extracción de estos crudos puede requerir el uso de técnicas de recuperación mejoradas, como la inyección de vapor o la fracturación hidráulica, lo que aumenta los costos y los desafíos ambientales. En cuanto al transporte, los petróleos crudos pesados y extrapesados tienen una baja fluidez y alta viscosidad, lo que hace que sea difícil de bombear a través de tuberías y tanques de almacenamiento. Para mejorar su fluidez y facilitar el transporte, estos crudos pueden requerir el uso de diluyentes o aditivos. Además, la alta mojabilidad de algunos sistemas roca-fluido hacia el aceite agrava esta situación. Este fenómeno se refiere a la tendencia de las rocas del reservorio a preferir el aceite en lugar del agua. La alta mojabilidad del aceite en las rocas reduce el flujo del petróleo a través de los poros del reservorio y de las tuberías, lo que disminuye el factor de recuperación y aumenta los costos operativos. A pesar de los desafíos, los petróleos crudos pesados y extrapesados son una fuente importante de hidrocarburos, y su explotación puede ser económicamente viable en ciertas circunstancias. Sin embargo, también es importante tener en cuenta los impactos ambientales y sociales asociados con su extracción y transporte, y buscar formas de minimizar estos impactos a través de prácticas más sostenibles y tecnologías más avanzadas. Teniendo en cuenta lo anterior, se han desarrollado diversas técnicas para mejorar la explotación del petróleo crudo pesado y extrapesado. Estas técnicas se basan en la modificación del petróleo y/o del medio donde se encuentra, mediante agentes físicos o químicos. Uno de los métodos más recientes y prometedores es el uso de nanotecnología para crear nanofluidos que puedan mejorar las propiedades del petróleo crudo pesado y facilitar su explotación. Los nanofluidos son suspensiones coloidales que contienen nanopartículas de materiales con propiedades magnéticas, ópticas, reológicas o térmicas únicas, en un medio líquido. Estos nanomateriales pueden modificar las propiedades del petróleo crudo pesado y del medio donde se encuentra, para hacerlo más fácil de extraer y transportar. En este sentido, en la presente investigación se sintetizaron nanofluidos acuosos a partir de nanopartículas de magnetita soportadas en óxido de grafeno y se determinó su obtención mediante varias técnicas de caracterización como difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido, espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier, dispersión de luz dinámica y espectroscopia ultravioleta-visible. Posteriormente, se evaluó su efecto sobre la tensión interfacial del petróleo, encontrando una disminución significativa de esta en función de la concentración del nanofluido. Asimismo, se realizó un ensayo de alteración de la mojabilidad de una muestra de roca de afloramiento con afinidad a ser mojada por aceite, en el que se estableció que, posterior a su inmersión en los nanofluidos con diferentes concentraciones de magnetita soportadas en óxido de grafeno durante un periodo de tres horas, hubo una disminución en su mojabilidad al aceite, que se vio reflejado en un incremento en el valor de ángulo de contacto. Los resultados obtenidos de este estudio indican que el uso de nanofluidos compuestos mejora significativamente las condiciones de yacimiento para la explotación del crudo, lo que podría resultar en un aumento en el factor de recobro.

Effect of organic thin films morphology and light-emitting layer thickness on the opto-electric properties in an organic light emitting diode

Efecto de la morfología de películas delgadas orgánicas y del espesor de la capa emisora de luz sobre las propiedades opto eléctricas en un diodo orgánico emisor de luz

G A Méndez Merchán¹, A M Ardila Vargas², and V Burgos Castro²

¹ Universidad Católica de Colombia, Bogotá, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: vburgosc@unal.edu.co

Abstract. Organic light-emitting diodes are becoming the emerging technology in high-quality displays and solid-state lighting because of their flexible structure, color quality, high efficiency, and, therefore, energy savings. Using the high vacuum thermal evaporation technique, thin films of the organic semiconductor compounds NPB (used as hole transporter), CBP:Ir(ppy)₂(acac) (used as phosphorescent emitter) and TPBi (used as electron transporter), were fabricated and morphologically characterized in order to determine the best preparation conditions for using these layers in the implementation of an organic light-emitting device. For this study, the deposition temperature of the different layers was varied, keeping the deposition rate constant in accordance with previous studies. The surface morphology of these samples was analyzed by atomic force microscopy, to obtain roughness values to determine the best deposit conditions. This study allowed us to define that the layers deposited at 22 °C present lower roughness values, compared to those deposited at higher temperatures. Subsequently, under this parameter, green light emitting devices were fabricated with the ITO/NPB/CBP:Ir(ppy)₂(acac)/TPBi/Al architecture, varying the thickness of the emitting layer at 15 nm, 20 nm, and 25 nm. The electrical properties of the device were determined by means of the current/voltage curve and the optical ones by means of the electroluminescence spectrum. The results indicate that the device with an emitting layer thickness of 15 nm is the one that presents the best-emitting properties.

Resumen. Los diodos orgánicos emisores de luz se están convirtiendo en la tecnología emergente en pantallas de alta calidad y en la iluminación de estado sólido, por tener una estructura flexible, calidad de color, alta eficiencia y, por tanto, ahorro de energía. Mediante la técnica de evaporación térmica en alto vacío, se fabricaron y caracterizaron morfológicamente películas delgadas de los compuestos orgánicos semiconductores NPB (usado como transportador de huecos), CBP:Ir(ppy)₂(acac) (usado como emisor fosforescente) y TPBi (usado como transportador de electrones), para determinar las mejores condiciones de preparación con el fin de usarlas en la implementación de un dispositivo emisor de luz orgánico; en este estudio se varió la temperatura de depósito de las diferentes capas, manteniendo constante la tasa de depósito de acuerdo con estudios previos. La morfología superficial de estas muestras se analizó por microscopía de fuerza atómica, con el fin de obtener valores de rugosidad para determinar las mejores condiciones de depósito. Asimismo, este estudio permitió definir que las capas depositadas a 22 °C presentan menores valores de rugosidad, comparadas con las depositadas a mayores temperaturas. Posteriormente, bajo este parámetro, se fabricaron dispositivos emisores de luz verde con la arquitectura ITO/NPB/CBP:Ir(ppy)₂(acac)/TPBi/Al, variando el espesor de la capa emisora en 15 nm, 20 nm y 25 nm. Las propiedades eléctricas del dispositivo se determinaron mediante la curva corriente/voltaje y las ópticas mediante el espectro de electroluminiscencia. Los resultados indican que el dispositivo con espesor de capa emisora de 15 nm es el que presenta las mejores propiedades emisoras.

Ni and Zn-doped YBCO nanowires produced by the Solution Blow Spinning technique

Nanohilos YBCO dopados con Ni y Zn producidos por la técnica Solution Blow Spinning

J M Batista Ferreira¹, D Chaves Davi Araujo², M Motta², W A Ortiz², and R Zadorosny¹

¹ Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira, Brazil,

² Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, Brazil

E-mail: rafael.zadorosny@unesp.br

Abstract. To investigate the effects of magnetic (Ni) and non-magnetic (Zn) doping on the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (Y_{123}) superconductor, fibers of the material were produced using the solution blow-spinning technique. This technique is advantageous over other methods for producing materials on a small scale, mainly due to the high productivity rate. Therefore, the precursor solution to be fibered must have an optimal viscosity for the technique to be effective. In this sense, polyvinylpyrrolidone is a stabilizing polymer in the synthesis of metallic materials and gives the solution levels of viscosity that can be controlled by the polymer concentration in the solution or by its molar mass. Thus, $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-n}\text{X}_n$ solutions were prepared, where $\text{X}=\text{Ni}$ or Zn and $n=0.01; 0.02$ and 0.04 , using metallic acetates and solvents (methanol, propionic acid, and acetic acid). After being blown in solution blow-spinning, the fibers were collected in a non-woven fabric, and thermal treatments were carried out for calcination and sintering. Scanning electron microscopy characterizations show a decreasing average fiber diameter after the heat treatment for small than 500 nm. The X-ray diffraction shows that the polyvinylpyrrolidone molar mass does not interfere with the material's phase formation, and all samples showed the BaCuO secondary phase. Furthermore, the doping elements were not identified in the X-ray characterization, suggesting that they may have entered the material's composition. From the Rietveld refinement, the Y_{123} and BaCuO phases are confirmed, and apparently, there is a change in the unit cell volume for samples with higher concentrations of dopants. However, these conclusions will be confirmed, for example, by magnetically characterizing the samples.

Resumen. Para investigar los efectos del dopaje magnético (Ni) y no magnético (Zn) en el superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (Y_{123}), se produjeron fibras del material utilizando la técnica "solution blow-spinning". Esta técnica es ventajosa sobre otros métodos para producir materiales a pequeña escala, principalmente debido a la alta tasa de productividad. Por lo tanto, la solución precursora a fibrar debe tener una viscosidad óptima para que la técnica sea efectiva. En este sentido, la polivinilpirrolidona es un polímero estabilizador en la síntesis de materiales metálicos y otorga a la solución niveles de viscosidad que pueden ser controlados por la concentración de polímero en la solución o por su masa molar. Así, se prepararon soluciones de $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-n}\text{X}_n$, donde $\text{X}=\text{Ni}$ o Zn y $n=0,01; 0,02$ y $0,04$, utilizando acetatos metálicos y disolventes (metanol, ácido propiónico y ácido acético). Luego de ser sopladas en "solution blow-spinning", las fibras fueron recolectadas en una tela no tejida, y se realizaron tratamientos térmicos de calcinación y sinterización. Las caracterizaciones de microscopía electrónica de barrido muestran un diámetro de fibra promedio decreciente después del tratamiento térmico por menos de 500 nm. La difracción de rayos X muestra que la masa molar de polivinilpirrolidona no interfiere con la formación de fase del material, y todas las muestras mostraron la fase secundaria de BaCuO . Además, los elementos dopantes no se identificaron en la caracterización por rayos X, lo que sugiere que pueden haber entrado en la composición del material. A partir del refinamiento de Rietveld, se confirman las fases Y_{123} y BaCuO y, aparentemente, hay un cambio en el volumen de la celda unitaria para muestras con concentraciones más altas de dopantes. Sin embargo, estas conclusiones se confirmarán, por ejemplo, mediante la caracterización magnética de las muestras.

Obtaining layers of titanium oxide on the surface of a titanium substrate

Obtención de capas de óxido de titanio sobre la superficie de sustrato de titanio

J J Barba Ortega¹, E C Paris², and M Rincón Joya¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

² Embrapa Instrumentação, São Carlos, Brazil

E-mail: mrinconj@unal.edu.co

Abstract. In this study, we have focused on obtaining titanium oxide layers on the surface of a titanium substrate. Titanium oxide obtained through anodizing possesses several distinctive properties when compared to conventional titanium oxide. The use of different electrolytes and current parameters during anodization leads to the formation of porous structures, resulting in an increased surface area, making it an excellent photocatalyst. Furthermore, the titanium oxide obtained through anodizing exhibits unique optical properties owing to its porous structure. From a mechanical perspective, the porous structure helps to enhance the adhesion to the substrate, as well as increasing the corrosion resistance of the substrate. Overall, the titanium oxide obtained through anodizing is a highly promising material with a wide range of applications, such as catalysts, sensors, optoelectronic devices, and protection against corrosion.

Resumen. En este estudio nos centramos en la obtención de capas de óxido de titanio sobre la superficie de un sustrato de titanio. El óxido de titanio obtenido a través de la anodización posee varias propiedades distintivas en comparación con el óxido de titanio convencional. El uso de diferentes electrolitos y parámetros de corriente durante la anodización conduce a la formación de estructuras porosas, lo que resulta en un aumento del área superficial, esto lo convierte en un excelente fotocatalizador. Además, el óxido de titanio obtenido mediante anodización exhibe propiedades ópticas únicas debido a su estructura porosa. Desde una perspectiva mecánica, la estructura porosa ayuda a mejorar la adhesión al sustrato, además de aumentar la resistencia a la corrosión del sustrato. En general, el óxido de titanio obtenido a través de la anodización es un material muy prometedor con una amplia gama de aplicaciones, como catalizadores, sensores, dispositivos optoelectrónicos y protección contra la corrosión.

Production of iron oxide-based nanoheterostructures for applications in magnetic hyperthermia therapy

Producción de nanoheteroestructuras basadas en óxido de hierro para aplicaciones en la terapia de hipertermia magnética

A P Corredor Figueroa¹, A N Morales², O Olarte², L García¹, and D Cadavid¹

¹ Universidad ECCI, Bogotá, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

E-mail: dycadavidr@unal.edu.co

Abstract. It is estimated that in the year 2020 about 10 million people worldwide will die of cancer. It is therefore important to find alternative non-invasive treatments that can counteract this disease. Currently, magnetic hyperthermia is a promising treatment as an adjuvant to eliminate cancer cells. In fact, the possibility has been studied that the nanoparticles used in the therapy, are nanoheterostructured materials, that is, nanomaterials made up of multiple components such as gold, cobalt, manganese, zinc, and silver among others, in order to obtain greater efficiency in the elimination of cancer cells. In this work, the synthesis of nanoheterostructures based on iron oxide and metals such as zinc, manganese and silver were carried out by the thermal decomposition method. The material characterization was carried out by X-ray diffraction, transmission electron microscopy and magnetization measurements. Monodisperse nanoheterostructures were obtained, with cubic morphology, with an average size of 30 nm, which proved to increase in temperature by more than 10 °C when subjected to an alternating magnetic field.

Resumen. Se estima que en el año 2020 cerca de 10 millones de personas, a nivel mundial, fallecieron a causa del cáncer. Por tanto, es importante encontrar tratamientos alternativos no invasivos que puedan contrarrestar esta enfermedad. Actualmente, la hipertermia magnética es un tratamiento prometedor como coadyuvante para eliminar las células cancerígenas. En efecto, se ha estudiado la posibilidad de que las nanopartículas utilizadas en la terapia sean materiales nanoheteroestructurados, es decir, nanomateriales conformados por múltiples componentes como oro, cobalto, manganeso, zinc y plata entre otros, con la finalidad de obtener una mayor eficiencia en la eliminación de células cancerígenas. En este trabajo se llevó a cabo la síntesis de nanoheteroestructuras basadas en óxido de hierro y metales como zinc, manganeso y plata, mediante el método de descomposición térmica. La caracterización del material se llevó a cabo por medio de difracción de rayos X, microscopía electrónica de transmisión y medidas de magnetización. Se obtuvieron nanoheteroestructuras monodispersas, con morfología cúbica, con tamaño promedio de 30 nm, las cuales, probaron aumentar la temperatura en más de 10 °C al ser sometidas a un campo magnético alterno.

Simulation of the absorber layer thickness variation in SnS solar cells using Matlab

Simulación de la variación del espesor de la capa absorbente en celdas solares de SnS empleando Matlab

C E Rondón Almeyda¹, C L Rojas Rincón¹, A Sepúlveda¹, M A Botero Londoño¹, and M A Mantilla Villalobos¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: marialem@uis.edu.co

Abstract. The study of thin-film solar cells based on SnS is becoming increasingly relevant due to its advantages over similar technologies, such as its low cost, toxicity, and the fact that its constituent elements are more abundant in the earth's crust. On the other hand, simulations allow modelling of the behavior of solar cells to understand the processes and improve the device's efficiency. Therefore, in this work, the simulation of a heterojunction with SnS/ZnS/ZnO configuration is carried out using mathematical models that represent the physical behavior of the solar cell. Two radiation models were evaluated, one using a theoretical equation and the other with data from the incident radiation in Bucaramanga, Colombia. The simulation was performed using Matlab. The optimal thickness of the absorbent layer was established from the results obtained for open circuit potential, short circuit current, and fill factor.

Resumen. El estudio de celdas solares de películas delgadas basadas en SnS cada vez toma mayor relevancia debido a las ventajas que presenta respecto a otras tecnologías similares, tales como su bajo costo, su toxicidad y que sus elementos constitutivos presentan mayor abundancia en la corteza terrestre. Las simulaciones permiten modelar el comportamiento de las celdas solares con el fin de entender los procesos y mejorar la eficiencia del dispositivo. A raíz de esto, en este trabajo se realiza la simulación de una heterojuntura con configuración SnS/ZnS/ZnO mediante modelos matemáticos que representan el comportamiento físico de la celda solar. La simulación se realizó empleando Matlab. Se evaluaron dos modelos de radiación, uno empleando una ecuación teórica y el otro con datos de la radiación incidente en Bucaramanga, Colombia. Se determinó la tensión de circuito abierto, la densidad de corriente de corto circuito, el factor de llenado y la eficiencia de la celda, con el fin de obtener el espesor más adecuado de la capa absorbente de SnS.

Synthesis and characterization of magnetic graphene oxide: nanomaterial with potential applications to reduce the viscosity of heavy oil

Síntesis y caracterización de óxido de grafeno magnético: nanomaterial con potenciales aplicaciones para reducir la viscosidad del petróleo pesado

E M Pérez Rodríguez¹, N Gutiérrez Niño¹, N Santos Santos¹, R Cabanzo Hernández¹, and E Mejía Ospino¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: emejia@uis.edu.co

Abstract. In one of its branches, nanotechnology studies the design of nanometer-sized materials which possess chemical and physical properties different from those of macroscopic material; when talking about magnetic particles the decrease in size brings a change in the magnetic behavior of the material, magnetite is currently one of the most studied magnetic nanoparticles; this type stands out for its low cost, its low coercive field, its ease of surface modification and its good magnetization levels (Du., Liu & Xia., 2016). The addition of magnetite nanoparticles has been applied in many fields, including construction with the use of magnetite as a load-bearing material increasing the weight of concrete, in medicine creating barriers to the propagation of radioactive emissions and has been considered in the hydrocarbon industry as an improved recovery option since magnetic nanoparticles can selectively adsorb asphaltenes and facilitate the breakage to single bonds (Nassar, Hassan., & Pereira-Almao., 2011) reducing the viscosity of the crude oil which allows it to flow between the rock without resistance; however, magnetite nanoparticles tend to form agglomerates due to strong anisotropic dipolar interactions, thus losing their dispersibility in aqueous media, which hinders their use in this field; this is why it becomes essential to immobilize these nanoparticles on supports to preserve their properties (Deng., Wen & Wang., 2012). Among a large group of materials, graphene and its derivatives are considered to have a high capacity for the immobilization of nanoparticles since graphene oxide has a lamellar structure that grants it a large surface area and high reactivity of its functional groups; graphene oxide-immobilized nanoparticles not only prevent aggregation, but also preserve the properties of nanoparticles through a synergistic effect between both components (Gómez., Cabanzo & Mejía-Ospino., 2019). In this study, the synthesis of graphene oxide was carried out by the modified Hummers method, then ferromagnetic nanoparticles were added by a bottom-up route, later washes were performed to purify the material and it was freeze-dried in order to obtain a powder for characterization. The material was spectroscopically characterized by Fourier-transform infrared spectroscopy which is a technique that provides structural information showing bands associated with graphene oxide and magnetite, additionally scanning electron microscopy was performed which is a microscopic technique that shows specific characteristics of the surface morphology and size of the material where a change in morphology is observed due to the presence of a new material on the surface of the graphene oxide film, this new material is magnetite evidenced by means of a punctual energy dispersive spectroscopy study and finally a thermogravimetric analysis as a complementary technique to determine the thermal behavior of the material where a degradation peak was obtained at 685 °C approximately, additionally, by exposing the material to a constant magnetic field its magnetization was corroborated due to the strong attraction it experienced towards the source of the field. Finally, this study was able to obtain a magnetic graphene oxide nanomaterial characterized by different techniques and presents it as a candidate for possible applications as a viscosity reducer of a heavy crude oil.

Resumen. En una de sus ramas, la nanotecnología estudia el diseño de los materiales de tamaño nanométrico los cuales poseen propiedades químicas y físicas diferentes a las del material macroscópico; cuando se habla de partículas magnéticas la disminución de tamaño acarrea un cambio en el comportamiento magnético del material, la magnetita es actualmente una de las nanopartículas magnéticas más estudiadas; este tipo se destaca por su bajo costo, su bajo campo coercitivo, su facilidad de modificación superficial y sus buenos niveles de magnetización (Du., Liu & Xia.,2016). La adición de nanopartículas de magnetita se ha aplicado en muchos campos , entre ellos se destacan la construcción con el uso de magnetita como material de carga aumentando el peso de los hormigones, en la medicina creando barreras a la propagación de emisiones radioactivas y se ha considerado en la industria hidrocarburífera como una opción de recobro mejorado puesto que las nanopartículas magnéticas pueden adsorber selectivamente los asfaltenos y facilitar el rompimiento a enlaces sencillos (Nassar., Hassan., & Pereira-Almao., 2011) reduciendo la viscosidad del crudo lo que permite que este fluya entre la roca sin resistencia; sin embargo, las nanopartículas de magnetita tienden a formar aglomerados debido a interacciones dipolares anisotrópicas fuertes, perdiendo así su dispersabilidad en medio acuoso, lo que dificulta su uso en este campo; es por esto que se hace indispensable inmovilizar estas nanopartículas en soportes para conservar sus propiedades (Deng., Wen & Wang., 2012). Entre un gran grupo de materiales, se considera que el grafeno y sus derivados tienen una alta capacidad para la inmovilización de nanopartículas puesto que el óxido de grafeno posee una estructura laminar que le concede una gran área superficial y alta reactividad de sus grupos funcionales; las nanopartículas inmovilizadas por óxido de grafeno no solo evitan la agregación, sino que también preservan las propiedades de las nanopartículas mediante un efecto sinérgico entre ambos componentes. (Gómez., Cabanzo & Mejía-Ospino., 2019). En este estudio se llevó a cabo la síntesis de óxido de grafeno por el método de Hummers modificado luego se adicionaron nanopartículas ferromagnéticas por una ruta bottom up, posteriormente se realizaron lavados para purificar el material y se llevó a liofilizar con el fin de obtener un polvo para caracterización. El material fue caracterizado espectroscópicamente mediante la espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier que es una técnica que brinda información estructural mostrando bandas asociadas al óxido de grafeno y a la magnetita, adicionalmente se le realizó microscopia electrónica de barrido que es una técnica microscópica que muestra características específicas de la morfología superficial y tamaño del material donde se observa un cambio en la morfología debido a la presencia de un nuevo material en la superficie de la lámina de óxido de grafeno, ese nuevo material es magnetita evidenciado por medio de un estudio puntual de espectroscopia de dispersión de energía y por ultimo un análisis termogravimétrico como técnica complementaria para determinar el comportamiento térmico del material donde se obtuvo un pico de degradación en 685 °C aproximadamente, adicionalmente, mediante la exposición del material a un campo magnético constante se corroboró su magnetización debido a la fuerte atracción que experimentó hacia la fuente del campo. Finalmente es este estudio se logró obtener un nanomaterial de óxido de grafeno magnético caracterizado por diferentes técnicas y lo presenta como candidato a posibles aplicaciones como reductor de la viscosidad de un crudo pesado.

Vortex state in a two-band mesoscopic superconductor/ferromagnetic hybrid system

Estado de vórtice en un sistema híbrido superconductor mesoscópico de dos bandas/ferromagnético

J C Pina Velásquez¹

¹ Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Brazil

E-mail: juan.carlos@ufpe.br

Abstract. We consider a two-band superconductor-ferromagnetic hybrid system by using the two-component Ginzburg-Landau model. In this system is possible to obtain different vortex configuration for each band, the so-called fractional vortex state. In this work we study the effect of the homogeneous magnetic field and the permanent magnetization of the ferromagnetic on the stability of fractional vortex state and the formation of vortex-antivortex pair and found that the permanent magnetization of the ferromagnetic favors to spontaneously access some fractional vortex state. Finally, we build up a phase diagram in the magnetic field-permanent magnetization plane for fractional vortex and vortex-antivortex states.

Resumen. Consideramos un sistema híbrido superconductor de duas bandas-ferromagnético utilizando el modelo Ginzburg-Landau de dos componentes. En este sistema es posible obtener diferentes configuraciones de vórtice para cada banda, el llamado estado de vórtice fraccional. En este trabajo estudiamos el efecto del campo magnético homogéneo y la magnetización permanente de los ferromagnéticos sobre la estabilidad del estado de vórtice fraccional y la formación del par vórtice-antivórtice donde encontramos que la magnetización permanente de los ferromagnéticos favorece el acceso espontáneo a algún estado de vórtice fraccional. Finalmente, construimos un diagrama de fase en el plano de campo magnético-magnetización permanente para estados de vórtice fraccional y vórtice-antivórtice.

Biomedical Coatings (BC)

Recubrimientos Biomédicos (BC)

Production and characterization of rhenium-carbon based coatings deposited by sputtering technique

Producción y caracterización de recubrimientos basados en renio y carbono depositados por pulverización catódica

G Orozco Hernandez¹, W A Aperador Chaparro², Y Pineda Triana³, J V Ramírez Monroy³, A P Corredor Figueroa¹, E Vera López³, and M L Lemus Rincón¹

¹ Universidad ECCI, Bogotá, Colombia

² Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

³ Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

E-mail: melanyl.lemusr@ecci.edu.co

Abstract. One of the most widely used techniques for producing highly homogeneous thin film coatings is physical vapor deposition; the magnetron-assisted sputtering technique has been extensively studied using targets of different elements and/or compounds. In this case, rhenium was studied as the element to coat pure titanium substrates, along with the use of carbon to achieve rhenium carbides like compounds which could improve the chemical and biocompatibility properties of the titanium substrate. A molybdenum target was also used as an anchoring layer to improve the adhesion of the upper layer. The deposition process parameters of this coating were the substrate temperature, target power, gas flow rate, substrate rotation, and target-to-substrate distance. In order to find the parameters that generated greater adhesion and uniformity in the deposition, a systematic study was conducted on the influence of these parameters on the coatings. The characterization of these layers was performed by scanning electron microscopy which showed that the visual adhesion of the coatings improved with increasing substrate temperature, energy dispersive spectroscopy showing the elemental species present on the surface confirming its homogeneity, and X-ray diffraction which showed signals of crystalline phases of compounds based on rhenium and carbon. Based on the best deposition process conditions, in vitro biocompatibility tests are being performed using trypan blue and MTT tests.

Resumen. Una de las técnicas de producción de recubrimientos en capa delgada más usadas y que generan alta homogeneidad, es la deposición física a vapor; la técnica de pulverización catódica asistida por magnetrón ha sido ampliamente estudiada usando targets de diferentes elementos, en este caso se estudiaron el Renio como elemento con el cual se recubrirían sustratos de titanio puro, ayudándonos también del carbono con el fin de conseguir carburos de renio que mejoren las propiedades químicas y de biocompatibilidad del sustrato; también se usó un target de molibdeno como capa de anclaje para mejorar la adherencia de la capa superior. Por medio de este recubrimiento, los factores o parámetros del proceso de depósito fueron la temperatura de los sustratos, la potencia de los blancos, el flujo de gases, la rotación de los sustratos, distancia blanco sustratos; con el fin de encontrar los parámetros que generaran mayor adherencia y uniformidad en la deposición, se hizo un estudio sistemático de la influencia de dichos parámetros en los recubrimientos. La caracterización de estas capas se realizó por medio de microscopia electrónica de barrido encontrando que la adherencia de los recubrimientos visualmente mejora al aumentar la temperatura del sustrato, espectroscopia de energía dispersiva que mostró las especies elementales presentes en la superficie confirmando a su vez la homogeneidad de la misma y difracción de rayos X que mostró señales de fases cristalinas de compuestos basados en renio y carbono. Basados en las mejores condiciones del proceso de depósito, se están realizando pruebas de biocompatibilidad in vitro por azul tripán y MTT.

Wear and Corrosion/Oxidation (WCO)

Desgaste y Corrosión/Oxidación (WCO)

Characterization of thermal films formed between 100 °C to 400°C on ASTM A-213 T91 (Fe₉Cr₁Mo) steel in atmospheres: H₂S-N₂-O₂ and air

Caracterización de películas térmicas formadas entre 100 °C a 400 °C sobre un acero ASTM A-213 T91 (Fe₉Cr₁Mo) en atmósferas: H₂S-N₂-O₂ y aire

M I Bedoya Moreno¹, and H A Estupiñan Durán¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

E-mail: haestupinand@unal.edu.co

Abstract. The ASTM A-213 T91 (Fe₉Cr₁Mo) steel is known in its applications for being resistant to high temperatures and resistant to gases, highly oxidizing, carburizing and sulfiding agents. Its use in the construction of catalytic conversion units in heavy crude oil still generates uncertainty, given the high demands on the formation of highly stable protective layers in the operating temperature ranges. Ferritic steels have been selected for use in the construction of crude refining units with thermocatalytic processes due to their adequate microstructure, their low carbon content and their balance between chromium and molybdenum content. The importance of these factors, both microstructural and compositional, which added to the enrichment of chemical elements from the gases produced from CO₂ and H₂S and from the heavy crude oil itself, is greatly reflected in the quality of the protective layers formed that serve as a barrier. Both thermal and physicochemical in an environment of highly aggressive atmospheres. This paper analyzes the characterization results of layers formed on an ASTM A-213 T91 (Fe₉Cr₁Mo) steel in atmospheres: H₂S-N₂-O₂ and air between 100 °C and 400 °C. Atomic force microscopy techniques in mechanical and electrical modes, confocal Raman spectroscopy, Raman thermometry, scanning electron microscopy and energy dispersive X-ray, were used to compare and discuss the obtained results. The characterization focused on analyzing the layers formed on this steel based on its structural stability.

Resumen. El acero ASTM A-213 T91 (Fe₉Cr₁Mo) se conoce en sus aplicaciones por ser resistente a temperaturas elevadas y resistentes a gases, altamente oxidantes, carburizantes y sulfidantes. Su uso en la construcción de unidades de conversión catalítica en crudos pesados, aún genera incertidumbre, dada las altas exigencias en la formación de capas protectoras altamente estables en los rangos de temperatura de operación. Los aceros ferríticos han sido seleccionados para uso en la construcción de unidades de refinación de crudo con procesos termocatalíticos por su adecuada microestructura, su bajo contenido de carbono y su balance entre el contenido de cromo y de molibdeno. La importancia de estos factores, tanto microestructurales como de composición, que sumado al enriquecimiento de elementos químicos provenientes de los gases producidos de CO₂ y H₂S y del mismo crudo pesado, se refleja enormemente en la calidad de las capas de protección formada que sirven de barrera tanto térmica como fisicoquímica ante un ambiente de atmósferas altamente agresivas. En este trabajo se analizan los resultados de caracterización de capas formadas sobre un acero ASTM A-213 T91 (Fe₉Cr₁Mo) en atmósferas: H₂S-N₂-O₂ y aire entre 100 °C a 400 °C. Técnicas de microscopía de fuerza atómica en los modos mecánicos y eléctricos, espectroscopía Raman confocal, termometría Raman, microscopía electrónica de barrido y energía dispersiva de rayos X, fueron empleadas para comparar y discutir los resultados obtenidos. La caracterización se enfocó en analizar las capas formadas sobre este acero en función de su estabilidad estructural.

Chemical species formed on the surface of borided AISI 316L under wet sliding wear

Especies químicas formadas en la superficie del AISI 316L borurado bajo desgaste por deslizamiento en húmedo

J Martínez Trinidad¹, R García², and E Flórez²

¹ Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México

² Universidad Francisco de Paula Santander, Ocaña, Colombia

E-mail: enflorez@ufpso.edu.co

Abstract. In this work, the evolution of the chemical species formed on the surface of the borided and non-borided AISI 316L steels during wet sliding conditions using a simulated body fluid (SBF Hanks solution) was investigated. The results revealed that the specific wear rate of the borided AISI 316L steel was approximately 4 times lower than that of the non-borided AISI 316L steel under the same wet sliding conditions. Also, the corrosion and wear resistance of both steels are related to combinations of reaction productions such as boron sulfide, chromium(III) oxide, and iron(III) oxide during sliding wear by the formation of the passive layer, according to the results obtained by X-Ray photoelectron spectrometry.

Resumen. En este trabajo se investigó la evolución de las especies químicas formadas en la superficie de los aceros AISI 316L borurados y no borurados durante condiciones de deslizamiento húmedo utilizando un fluido corporal simulado (solución de SBF Hank). Los resultados revelaron que la tasa de desgaste específica del acero AISI 316L con boruro fue aproximadamente 4 veces menor que la del acero AISI 316L sin boruro en las mismas condiciones de deslizamiento húmedo. Asimismo, la resistencia a la corrosión y al desgaste de ambos aceros está relacionada con combinaciones de producciones de reacción como sulfuro de boro, óxido de cromo (III) y óxido de hierro durante el desgaste por deslizamiento por la formación de la capa pasiva, según los resultados obtenidos por espectroscopia de fotoelectrones emitidos por rayos X.

Comparative analysis of thermal films formed between 100 °C to 400 °C on ASTM A-213 T92 steel (Fe₉Cr_{0.5}Mo) in atmospheres: H₂S-N₂-O₂ and air

Análisis comparativo de películas térmicas formadas entre 100 °C a 400 °C sobre un acero ASTM A-213 T92 (Fe₉Cr_{0.5}Mo) en atmósferas: H₂S-N₂-O₂ y aire

M I Bedoya Moreno¹, and H A Estupiñan Durán¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

E-mail: haestupinand@unal.edu.co

Abstract. Steels resistant to high temperatures are being used in the construction of catalytic conversion units for heavy crude oils with highly oxidizing, sulfiding and fueling environments. There is currently a strong debate on the selection of steels for these applications, whether with austenitic steels or ferritic steels, the latter being conveniently selected for their adequate microstructure, their low carbon content and their balance between chromium and molybdenum content. The importance of these factors, both microstructural and compositional, which added to the enrichment of chemical elements from the gases produced and from the heavy crude oil itself, is greatly reflected in the quality of the protective layers formed that serve as both a thermal and physicochemical barrier. In the face of a highly aggressive environment in these crude catalytic conversion units. This paper discusses the characterization results of layers formed on an ASTM A-213 T92 (Fe₉Cr_{0.5}Mo) steel in atmospheres: H₂S-N₂-O₂ and air between 100 °C and 400 °C. Atomic force microscopy techniques in mechanical and electrical modes, confocal Raman spectroscopy, Raman thermometry, scanning electron microscopy and energy dispersive X-rays, were used to compare and discuss the obtained results. The comparisons focused on the relatively higher structural stability of the layers obtained by sulfidation than those obtained by oxidation.

Resumen. Aceros resistentes a temperaturas elevadas están siendo usados en la construcción de unidades de conversión catalítica de crudos pesados con ambientes altamente oxidantes, sulfidantes y carburantes. Existe actualmente un fuerte debate en la selección de aceros para estas aplicaciones, ya sea con aceros austeníticos o aceros ferríticos, siendo estos últimos convenientemente seleccionados por su adecuada microestructura, su bajo contenido de carbono y su balance entre el contenido de cromo y de molibdeno. La importancia de estos factores, tanto microestructurales como de composición, que sumado al enriquecimiento de elementos químicos provenientes de los gases producidos y del mismo crudo pesado, se refleja enormemente en la calidad de las capas de protección formada que sirven de barrera tanto térmica como fisicoquímica ante un ambiente altamente agresivo en estas unidades de conversión catalítica de crudo. En este trabajo se discuten los resultados de caracterización de capas formadas sobre un acero ASTM A-213 T92 (Fe₉Cr_{0.5}Mo) en atmósferas: H₂S-N₂-O₂ y aire entre 100 °C a 400 °C. Técnicas de microscopía de fuerza atómica en los modos mecánicos y eléctricos, espectroscopía confocal Raman, termometría Raman, microscopía electrónica de barrido y energía dispersiva de rayos X, fueron empleadas para comparar y discutir los resultados obtenidos. Las comparaciones se enfocaron en la relativamente mayor estabilidad estructural de las capas obtenidas por sulfidación que las obtenidas por oxidación.

Improvement of the physicochemical properties of a Colombian heavy crude under thermal recovery conditions with oil-soluble catalysts and their effect on the corrosion of API P110 steel

Mejoramiento de las propiedades fisicoquímicas de un crudo pesado colombiano en condiciones de recobro térmico con catalizadores solubles en aceite y su efecto en la corrosión del acero API P110

J E Sanabria Becerra¹, A Y León Bermúdez¹, D Molina Velasco¹, and E Ariza León¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: earizal@uis.edu.co

Abstract. World oil reserves indicate that a high percentage corresponds to heavy and extra-heavy crudes. Therefore, in order to take advantage of these crudes, it is necessary to establish new studies and tools. In this investigation, the effect of three catalysts such as FeN, NiN and NMo with a concentration of 100 ppm in relation to the metal in a Colombian heavy crude oil of 12.8° API and viscosity of 22000 cp (@ 30 °C) was evaluated. The tests were carried out in a batch reactor at 450 psi (@ 25 °C) and two temperatures of 220 °C and 270 °C, during 66 hours of reaction. The crudes improved by tests of density, viscosity, Maltene/Asphaltene content and their molecular structure by nuclear magnetic resonance. The tests at 270 °C showed an improvement in the physicochemical properties following the order of performance as NFe>NNi>NMo. The presence of iron naphthenate reduced the viscosity of the crude by around 60% and the density of the oil was decreased by 3° API units. On the other hand, the tests carried out at 220 °C showed deterioration in the physicochemical properties of the improved crude, significantly increasing the viscosity, density and asphaltene content. Additionally, the aqua-thermolysis tests without catalyst showed a corrosion rate on API P-110 steel in the gas phase in the range of 0.02662 mm/y - 0.0503 mm/y, and in the liquid phase between 0.002567 mm/y - 0.02979 mm/y. Meanwhile, the aqua-thermolysis test in the presence of iron naphthenate reduced the corrosion rate in the range of 34% - 50% and between 46% - 70% for the gas and liquid phase, respectively. The results show that the catalytic aqua-thermolysis method improves the physicochemical properties of the crude and the integrity of the API P-110 steel.

Resumen. En esta investigación se evaluó el efecto de tres catalizadores como FeN, NiN y NMo con concentración de 100 ppm en relación al metal en un crudo pesado colombiano de 12,8° API y viscosidad de 22000 cp (@ 30 °C). Las pruebas se realizaron en un reactor batch a 450 psi (@ 25 °C) y dos temperaturas de 220 °C y 270 °C, durante 66 horas de reacción. Los crudos mejorados mediante pruebas de densidad, viscosidad, contenido de Maltenos/Asfaltenos y su estructura molecular por resonancia magnética nuclear. Las pruebas a 270 °C mostraron un mejoramiento en las propiedades fisicoquímicas siguiendo el orden de desempeño como NFe>NNi>NMo. La presencia de naftenato de hierro redujo la viscosidad del crudo alrededor de 60% y se disminuyó la densidad del en 3 unidades ° API. Por otra parte, las pruebas realizadas a 220 °C presentaron desmejoramiento en las propiedades fisicoquímicas del crudo mejorado, aumentando significativamente la viscosidad, densidad y contenido de asfaltenos. Adicionalmente, las pruebas de acuatermolisis sin catalizador presentaron en la fase gas una velocidad de corrosión sobre el acero API P-110 en el rango de 0,02662 mm/y – 0,0503 mm/y, y en la fase líquida entre 0,002567 mm/y – 0,02979 mm/y. Entre tanto, la prueba de acuatermolisis en presencia de naftenato de hierro redujo la tasa de corrosión en el intervalo de 34% - 50% y entre 46%-70% para la fase gaseosa y líquida, respectivamente. Los resultados muestran que el método de acuatermolisis catalítica mejora las propiedades fisicoquímicas del crudo y la integridad del acero API P-110.

Online Process Control (OPC)

Control de Procesos en Línea (OPC)

Application of liquid polystyrene products as a viscosity reducer for heavy Colombian crude oils

Aplicación de productos líquidos de poliestireno como reductor de la viscosidad de crudos pesados colombianos

A Vaca Arévalo¹, E Ariza León¹, and A Y León Bermúdez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: adanleon@uis.edu.co

Abstract. Heavy and extra-heavy crude oils are of great interest to the petroleum industry since they are the most abundant fossil fuels at present in comparison with the production of light crude oils. Therefore, due to the difficult process of extraction and transportation of these crude oils, the petroleum industry has seen the need to develop new studies and technologies that facilitate extraction and, at the same time, reduce operating costs. On the other hand, the increase of plastic waste such as polystyrene has been affecting ecosystems, so there is a need to find a solution, and one of them is the transformation into liquid products through the pyrolysis process. In this research, low density expanded polystyrene was subjected to thermal cracking conditions at 430 °C, 400 psi in a nitrogen atmosphere for 40 minutes of reaction. Then, the polystyrene liquid products were applied as a viscosity reducing agent in 3 Colombian heavy crude oils, which presented viscosities in the range of 500 cp to 16000 cp @ 30 °C. Meanwhile, the addition of polystyrene liquids with dosages between 0.5% to 7% in volume, allowed viscosity reductions in the range of 3% to 65%. However, the results showed greater viscosity reductions in the heavier crude oils. Characterization of the liquid products by infrared spectroscopy indicated that the polystyrene was transformed into simple aromatic structures with short alkyl chains. This indicates that the dosage of these simple aromatic structures has favorable interactions with the heavy crude oil constituents. Therefore, the thermal treatment of expanded polystyrene and the application of its liquid products are an alternative for the permanent improvement of the properties of heavy crude oils.

Resumen. Los crudos pesados y extrapesados son de gran interés para la industria petrolera, puesto que son las energías fósiles con mayor abundancia en la actualidad en comparación con la producción de los crudos livianos. Por tanto, debido al difícil proceso de extracción y transporte de estos crudos, la industria del petróleo ha visto la necesidad de desarrollar nuevos estudios y tecnologías que faciliten la extracción y al mismo tiempo, reduzcan los costos operativos. Por otra parte, el incremento de los residuos plásticos como el poliestireno ha venido afectando los ecosistemas, por lo que existe la necesidad de buscar una solución, y una de ellas es la transformación hacia productos líquidos mediante el proceso de pirólisis. En esta investigación el poliestireno expandido de baja densidad se sometió a condiciones de craqueo térmico a 430 °C, 400 psi en atmósfera con nitrógeno durante 40 minutos de reacción. Luego, los productos líquidos del poliestireno fueron aplicados como agente reductor de viscosidad en 3 crudos pesados colombianos, los cuales presentaron viscosidades en el intervalo de 500 cp a 16000 cp @ 30 °C. Entre tanto la adición de los líquidos de poliestireno con dosificaciones entre 0,5% a 7% en volumen, permitió reducciones de viscosidad en el intervalo de 3% a 65%. Sin embargo, los resultados mostraron mayores reducciones de viscosidad en los crudos más pesados. La caracterización de los productos líquidos mediante espectroscopia de infrarrojo indica que el poliestireno se transformó en estructuras aromáticas simples con cadenas alquílicas cortas. Lo anterior indica que la dosificación de estas estructuras aromáticas simples presenta interacciones favorables con los constituyentes de los crudos pesados. Por tanto, el tratamiento térmico del poliestireno expandido y la aplicación de sus productos líquidos son una alternativa para el mejoramiento permanente de las propiedades de los crudos pesados.

**Education in Materials Science, Engineering and Technology
(EMSET)**

**Educación en Ciencia, Ingeniería y Tecnología de Materiales
(EMSET)**

Applied research at the Institución Universitaria Pascual Bravo, Colombia

La investigación aplicada en la Institución Universitaria Pascual Bravo, Colombia

E Mejía Restrepo¹, M I Padilla Diaz¹, and E Muñoz¹

¹ Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

E-mail: e.munoz@pascualbravo.edu.co

Abstract. Applied research is defined as "the generation of knowledge with direct application and in the medium term in society or in the productive sector". In the case of the Pascual Bravo University Institution, it is addressed directly by the institutional research groups through systematic, methodical, and critical activities based on knowledge and practical and collaborative experience. With it, technology is created, developed, integrated, transformed, improved, and prototyped for use in different fields and for the generation of new processes, products, and services in response to the needs, trends, and opportunities of the local, national, and international environment. In favor of technological progress and the improvement of the quality of life in society. The applied research model is based on the work of the research groups, currently, there are five institutional research groups, which are mentioned below: Grupo de Investigación e Innovación en Energía, Grupo de Investigación e Innovación Ambiental, Grupo de Investigación en Ciencias Electrónicas e Informáticas, Grupo de Investigación en Calidad y Productividad, and ICONO. The first three groups are attached to the Faculty of Engineering and the next two to the Faculty of Production and Design, they carry out their work under established research lines (22 in total), consistent with the training objectives of the academic programs of both Faculties. The model raises several levels, positioning under the research groups, the research seedbeds, support for extracurricular and voluntary training at different academic levels: secondary and undergraduate; that are nourished and in turn feed the research groups, working in the lines structured around the objects of technological knowledge of the institution. This bidirectional link between seedbeds and groups allows students to train in research, and strengthen a critical, creative, and innovative spirit that responds to real problems in different sectors: company, community, and state. In addition to the above, in the model the actors are visualized, such as the training personnel: seedbed coordinators, administrative personnel: group leaders, and management personnel: line and articulation leaders with teaching; all of them are fundamental figures in the model that allow an impact on academic curricula and guarantee the development of research. Finally, it is important to highlight that the applied research developed in the institution allows it to respond to the needs of the environment, generating productivity and business competitiveness, social well-being of the communities, and economic and sustainable development of the regions. Guaranteeing through the innovation, transfer, and services program the transfer of knowledge generated in the research groups to society.

Resumen. La investigación aplicada es definida como la generación de conocimiento con aplicación directa y a mediano plazo en la sociedad o en el sector productivo. En el caso de la Institución Universitaria Pascual Bravo, se aborda directamente desde los grupos de investigación institucionales mediante actividades sistemáticas, metódicas y críticas fundamentadas en conocimiento y experiencia práctica y colaborativa. Con ella se crea, desarrolla, integra, transforma, mejora y prototipa la tecnología para su uso en diferentes ámbitos y para la generación de nuevos procesos, productos y servicios como respuesta a las necesidades, tendencias y oportunidades del entorno local, nacional e internacional, en favor del progreso tecnológico y el mejoramiento de la calidad de vida en la sociedad. El modelo de investigación aplicada se sustenta en el trabajo de los grupos de investigación, actualmente existen cinco grupos de investigación institucional, los cuales se mencionan a continuación: Grupo de Investigación e Innovación en Energía, Grupo de Investigación e Innovación Ambiental, Grupo de Investigación en Ciencias Electrónicas e Informáticas,

Grupo de Investigación en Calidad y Productividad, e ICONO. Los tres primeros grupos están adscritos a la Facultad de Ingeniería y los dos siguientes a la Facultad de Producción y Diseño, estos realizan su trabajo bajo líneas de investigación establecidas (22 en total), concordantes con los objetos de formación de los programas académicos de ambas Facultades. El modelo plantea varios niveles, posicionando bajo los grupos de investigación, los semilleros de investigación, soporte de la formación extracurricular y voluntaria en diferentes niveles académicos: secundaria y pregrado; que se nutren y su vez alimentan a los grupos de investigación, trabajando en las líneas estructuradas en torno a los objetos de conocimiento tecnológico propios de la Institución. Este enlace bidireccional entre semilleros y grupos permite a los estudiantes formarse en investigación, fortalecer un espíritu crítico, creativo e innovador que dé respuesta a problemas reales de los diferentes sectores: empresa, comunidad, estado. Aunado a lo anterior, en el modelo se visualizan los actores, tales como el personal formativo: coordinadores de semillero, personal administrativo: líderes de grupo, y personal de direccionamiento: líderes de línea y articulación con docencia; todos, figuras fundamentales en el modelo que permiten un impacto en los currículos académicos y garantizan el desarrollo de la investigación. Finalmente, es importante resaltar que la investigación aplicada desarrollada en la institución permite dar respuesta a las necesidades del entorno generando productividad y competitividad empresarial, bienestar social de las comunidades y desarrollo económico y sostenible de las regiones. Garantizando por medio del programa de innovación transferencia y servicios la transferencia de conocimiento generados en los grupos de investigación a la sociedad.

Characterization of energy fluctuations in an electronic system connected to a Maxwell's demon implemented with CMOS inverter pairs

Caracterización de las fluctuaciones en la energía observadas en un sistema electrónico conectado a un demonio de Maxwell implementado con pares inversores CMOS

S Vega Ortega¹, J E Jerez Vera¹, D A Miranda Mercado¹, and J A Quintero Graut¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: jorge2228523@correo.uis.edu.co

Abstract. The energy in an electronic system is determined by the potential difference and the electrical charge carriers on it. In the case of CMOS transistors, the electrical charge carriers may be electrons or holes, which may be subjected to a potential difference imposed by the connection of the electronic system to an external voltage source. Assuming an ideal constant voltage source, the imposed potential difference can be a time-invariant constant, *i.e.*, fluctuations-free. However, electrons, or holes, interacting with the external electric potential may manifest fluctuations in their energy, *e.g.*, due to thermal effects. Consequently, the energy of charge carriers can be modeled as a random variable with which a standard deviation is associated, characterizing their fluctuations. Recently, Freitas and Esposito demonstrated that a CMOS inverter pair can be configured as Maxwell's daemon, thus allowing the study in the laboratory of out-of-equilibrium processes that also exhibit the atypical phenomenon associated with such daemon. In this work, we report the implementation of a CMOS electronic system with a Freitas-Esposito Maxwell's daemon, which was characterized by measurements long enough in time to capture the statistical information of the system. Among the results observed in this study, two stand out: first, the observation of fluctuations in the potential difference consistent with those expected in a Brownian motion and second, the observation of two energy states for conditions of low external excitation or even in the absence of external excitation.

Resumen. La energía en un sistema electrónico está determinada por la diferencia de potencial y los portadores de carga eléctrica que la experimentan. En el caso de transistores CMOS, los portadores de carga eléctrica pueden ser electrones o huecos, que pueden estar sometidos a una diferencia de potencial impuesta por la conexión del sistema electrónico a una fuente de voltaje externa. Si se supone una fuente de voltaje constante ideal, se puede considerar que la diferencia de potencial impuesta es una constante invariante en el tiempo, es decir, carece de fluctuaciones. Sin embargo, los electrones, o huecos, que interactúan con el potencial eléctrico externo pueden manifestar fluctuaciones en su energía, por ejemplo, debidas a efectos térmicos. En consecuencia, la energía de los portadores de carga puede ser modelada como una variable aleatoria a la que se le asocia una desviación estándar, la cual caracteriza sus fluctuaciones. Recientemente Freitas y Esposito demostraron que un par inversor CMOS puede ser configurado como un demonio de Maxwell, permitiendo así estudiar en el laboratorio procesos fuera del equilibrio que además exhiben el atípico fenómeno asociado a este demonio. En este trabajo se reporta la implementación de un sistema electrónico CMOS con un demonio de Maxwell tipo Freitas-Esposito, el cual fue caracterizado a partir de mediciones suficientemente largas en el tiempo para capturar la información estadística del sistema. Entre los resultados observados en este estudio se destacan dos, primero, la observación de fluctuaciones en la diferencia de potencial consistentes con las esperadas en un movimiento browniano y segundo, la observación de dos estados de energía para condiciones de baja excitación externa o, incluso, en la carencia de excitación externa.

Crack growth analysis using the dual boundary element method, an application in Matlab

Análisis de crecimiento de grieta utilizando el método dual de elementos de contorno, un aplicativo en Matlab

J A Mantilla Villalobos¹, R A Cristancho Perilla¹, O R Bohórquez Becerra¹, and M J Martínez¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: mjmartin@uis.edu.co

Abstract. Integrity engineering predicts the service life of mechanical components under fatigue conditions as a function of the number of load cycles, a parameter that depends on the reliability of the element and must be calculated. High reliability is usually achieved by fracture mechanics design, where controlled crack propagation is analyzed until element failure. It has been identified the necessity to make a transition from the traditional design model based on the Basquin curve to crack growth models that are well defined in the literature; however, the fracture mechanics analysis can only be developed analytically for simple geometries with simplifications, which then implies the use of numerical methods and advanced software in the design process. Existing fracture mechanics software can perform both analysis and visualization of the phenomenon by highly skilled users at high computational cost, proving that these computational packages are not an effective solution and can hardly be used as learning tools in the classroom. This work presents the development of software for crack growth analysis using the dual boundary element method, a method that reduces computational cost by solving only the element boundary and shows multiple advantages for solving complex geometries with mixed boundary conditions, applied to two-dimensional simulations in homogeneous and isotropic materials. The software has been designed as a modular Matlab application with the goal of providing an easy-to-use tool for solving fatigue crack growth simulation problems. The results suggest that an easily portable software has been developed that can be used without Matlab, is suitable for the generation of new simulations in research and teaching, allows the visualization of the propagation phenomenon and the fundamental variables in crack growth analysis, and presents a logical sequence in the use of numerical methods. The simulations were validated with experimental data and with different simulations using the finite element method. Finally, the shortcomings and future perspectives are discussed.

Resumen. Para componentes mecánicos solicitados en fatiga, la ingeniería de integridad predice su vida útil en función del número de ciclos de carga, parámetro que depende de la confiabilidad del elemento y que debe calcularse. Una práctica común para obtener una alta confiabilidad es el diseño por mecánica de la fractura, en donde se analiza la propagación controlada de una grieta hasta la falla del elemento. Actualmente se ha identificado la necesidad de realizar una transición desde el modelo tradicional de diseño basado en la curva de Basquin hacia modelos de crecimiento de grieta que se encuentran bien definidos en la literatura, no obstante, el análisis de mecánica de fractura solo se puede desarrollar de manera analítica para geometrías sencillas con simplificaciones, lo que implica entonces, hacer uso de métodos numéricos y software especializados en el proceso de diseño. En los softwares de mecánica de fractura existentes se logra ejecutar un análisis y visualización del fenómeno por usuarios altamente capacitados en la materia, con un elevado costo computacional, lo que evidencia que estos paquetes computacionales no representan una alternativa eficaz de solución y difícilmente pueden ser utilizados como herramientas de aprendizaje en el aula. Este trabajo presenta el desarrollo de un software para el análisis de crecimiento de grieta utilizando el método dual de elementos de contorno, método que disminuye el costo computacional al solucionar únicamente el contorno del elemento y que muestra múltiples beneficios para solucionar geometrías complejas con condiciones mixtas de frontera, aplicado para simulaciones bidimensionales en materiales homogéneos e

isotrópicos. El software fue diseñado por módulos a manera de aplicativo en Matlab, con el propósito de obtener una herramienta de fácil operación para la solución por simulación del crecimiento de grieta por fatiga. Los resultados obtenidos indican que se desplegó un software de fácil distribución que no necesita de Matlab para su operación, que es versátil para la generación de nuevas simulaciones en investigación y enseñanza, que permite la visualización del fenómeno de propagación y de variables fundamentales en el crecimiento de grieta y que presenta una secuencia lógica en el desarrollo del método numérico. Las simulaciones se validaron con datos experimentales y con varias simulaciones que utilizaron el método de elementos finitos. Finalmente se discuten las limitaciones y perspectivas futuras del aplicativo desarrollado.

Didactics and curricular innovation in the faculty of engineering

Didáctica e innovación curricular en la facultad de ingeniería

L M Dueñas Ramírez¹, L F Ortiz Vásquez², C A Penagos Suarez¹, and J U Palomeque Martínez¹

¹ Corporación Universitaria Minuto de Dios, Bello, Colombia

² Foundation of Researchers in Science and Technology of Materials, Bucaramanga, Colombia

E-mail: julio.palomeque.m@uniminuto.edu.co

Abstract. The classroom is the appropriate space to form and strengthen learning communities of students and teachers, from different areas of knowledge where research processes can be carried out as a tool for learning, involving the student actively in the process. This model has been affected by the pandemic generated by COVID 19. Therefore, this work sought to design a didactic tool supported by the processes of scientific research for the transfer of knowledge in the classroom, during the learning of mathematics, statistics and physics. Research applied in the classroom was proposed under a quali-quantitative methodology that used three methods of data collection: observation, case study and survey. These three methods allowed consolidating the necessary information to establish a methodological tool based on the steps and processes of scientific research as a means not only to generate new knowledge, but also to appropriate it through the sharing and construction of knowledge between the student and the teacher. The tool has been implemented by several professors of the Corporación Universitaria Minuto de Dios in the city of Bello in Antioquia, Colombia. The main results obtained have been a validation of the students' knowledge before the academic community of the institution through exhibition days by means of research posters where the students orally give an account of the knowledge acquired in class, applied to topics applied by each student. A web page was also developed to support the application process of the didactic tool, so that teachers and students could have an online guidance on how to approach and apply the tool in class. This strategy has already started to be implemented in other sites of the institution and the results are expected to be applied in other geographical contexts.

Resumen. El aula de clase es el espacio propicio para formar y fortalecer comunidades de aprendizaje de estudiantes y profesores, de distintas áreas de conocimiento en donde se pueden adelantar procesos de investigación como herramienta para aprender involucrando al estudiante de forma activa en el proceso. Este modelo se ha visto afectado por la pandemia generada por el COVID 19. Por lo anterior este trabajo buscó diseñar una herramienta didáctica apoyada en los procesos propios de la investigación científica para la transferencia de conocimiento en el aula de clase; durante el aprendizaje de materias de matemáticas, estadística y física. Se planteó una investigación aplicada en el aula de clase bajo una metodología cuali-cuantitativa que utilizó tres métodos de recolección de datos: observación, caso de estudio y encuesta. Estos tres métodos permitieron consolidar la información necesaria para establecer una herramienta metodológica basada en los pasos y procesos de la investigación científica como un medio no solo para generar nuevo conocimiento, si no para apropiarse de este a través del compartir y construcción de saberes entre el estudiante y el profesor. La herramienta ha sido implementada por varios profesores de la Corporación Universitaria Minuto de Dios de la ciudad de Bello en Antioquia Colombia. Los principales resultados obtenidos han sido una validación del conocimiento de los estudiantes ante la comunidad académica de la institución a través de jornadas de exposición por medio de posters de investigación en donde de forma oral los estudiantes dan cuenta de los conocimientos afianzados en clase, aplicados a temas aplicados por cada estudiante. También se desarrolló una página web como apoyo al proceso de aplicación de la herramienta didáctica; para que profesores y estudiantes tuvieran un direccionamiento en línea de cómo abordar y aplicar la herramienta en clase. Ya se empezó a implementar esta estrategia en otras sedes de la institución y se esperan resultados de aplicación en otros contextos geográficos.

**Science, Engineering, Technology, and Innovation for Social
Inclusion (SETISI)**

**Ciencia, Ingeniería, Tecnología e Innovación para la inclusión social
(SETISI)**

Bibliometric study of the application of industry 4.0 in process control through Scopus and Web of Science databases (2013-2022)

Estudio bibliométrico de la aplicación de la industria 4.0 en el control de procesos a través de bases de datos Scopus y Web of Science (2013-2022)

K Y Cruzado Yesquén¹, A Alviz Meza¹, M H Vásquez Coronado¹, E A Torres Salazar¹, M L Castañeda Hipólito¹, S Y Gastiaburú Morales¹, and H Álvarez Vásquez¹

¹ Universidad Señor de Sipán, Chiclayo, Perú

E-mail: avasquezh@uss.edu.pe

Abstract. Industries interested in offering their products or services to the consumer and supplier are always focused on quality and productivity expectations, respectively. Quality and productivity are as much value as the integrity of the processes. This integrity is typically recognized as process control, which refers to analyzing, monitoring, supervising, and performing activities such as planning, mapping, and automatization. On the other hand, industry 4.0 has emerged as a series of technological tools that can be incorporated into several industrial facilities. This research aims to carry out a bibliometric analysis of the application of industry 4.0 in process control from 1972-2022 through Scopus and Web of Science databases. The studied data were extracted from the citation, bibliographic, abstract, and keyword information released by the collected articles. These data were processed in RStudio and VOSviewer. As a result, it was observed that the delivery of articles is under exponential growth. In addition, it was found that the most cited articles are related to the detection of anomalies in process control by using deep and automatic learning as the preferred technology to improve decision-making.

Resumen. Las industrias interesadas en ofrecer sus productos o servicios al consumidor y al proveedor se centran siempre en las expectativas de calidad y productividad, respectivamente. La calidad y la productividad tienen tanto valor como la integridad de los procesos. Esta integridad es típicamente reconocida como control de procesos, que se refiere al análisis, monitoreo, supervisión y realización de actividades como planificación, mapeo y automatización. Por otro lado, la industria 4.0 ha surgido como una serie de herramientas tecnológicas que pueden incorporarse a diversas instalaciones industriales. Esta investigación tuvo como objetivo realizar un análisis bibliométrico de la aplicación de la industria 4.0 en el control de procesos desde 1972-2022 a través de las bases de datos Scopus y Web of Science. Los datos estudiados se extrajeron de la información de citas, bibliográfica, resúmenes y palabras clave publicadas por los artículos recopilados. Estos datos se procesaron en RStudio y VOSviewer. Como resultado, se observó que la entrega de artículos está en crecimiento exponencial. Además, se encontró que los artículos más citados están relacionados con la detección de anomalías en el control de procesos mediante el uso del aprendizaje profundo y automático como tecnología preferida para mejorar la toma de decisiones.

Bibliometric study on the impact of industry 4.0 on business management in the decade (2013-2022)

Estudio bibliométrico sobre el impacto de la industria 4.0 en la gestión empresarial en el decenio (2013-2022)

K Y Cruzado Yesquén¹, A Alviz Meza¹, M H Vásquez Coronado¹, E A Torres Salazar¹, M L Castañeda Hipólito¹, S Y Gastiaburú Morales¹, H Álvarez Vásquez¹, and E J Saavedra Ruíz¹

¹ Universidad Señor de Sipán, Chiclayo, Perú

E-mail: sruizerinsonjos@crece.edu.pe

Abstract. Sustainability and competitiveness in the business world demand constant innovation, linked to the introduction of emerging technologies that enable efficient management in the manufacturing industry. Industry 4.0 has had a significant impact on all business fields since its areas of application include human resources, customer relationship management, marketing, finance, and production departments. Applying these tools allows the interrelation of operational areas, aiming to increase productivity. Therefore, through this research, it is intended to perform a descriptive bibliometric analysis, regarding the impact of Industry 4.0 on business management during the last decade (2013-2022). Articles indexed in the Scopus and Web of Science databases were analyzed based on the data extracted from their indicators of citation, bibliography, abstract, and keywords. This data was analyzed in the RStudio and VOSviewer. As a result, we found that the production of articles on the studied subject in recent years has grown exponentially in both databases. The principal technologies included in the manufacturing process were linked with artificial intelligence and big data. The most cited articles indicate that intelligent manufacturing is becoming highly relevant in process optimization. This bibliometric analysis suggests that the insertion of Industry 4.0 in organizations has a positive impact on decision-making, improving the direction of business management.

Resumen. La sostenibilidad y la competitividad en el mundo empresarial exigen una innovación constante, ligada a la introducción de tecnologías emergentes que permitan una gestión eficiente en la industria manufacturera. La Industria 4.0 ha tenido un impacto significativo en todos los ámbitos empresariales, ya que sus áreas de aplicación incluyen los recursos humanos, la gestión de las relaciones con los clientes, el marketing, las finanzas y los departamentos de producción. La aplicación de estas herramientas permite la interrelación de las áreas operativas, con el objetivo de aumentar la productividad. Por ello, a través de esta investigación, se pretende realizar un análisis bibliométrico descriptivo, respecto al impacto de la Industria 4.0 en la gestión empresarial durante la última década (2013-2022). Se analizaron artículos indexados en las bases de datos Scopus y Web of Science a partir de los datos extraídos de sus indicadores de citación, bibliografía, resumen y palabras clave. Estos datos se analizaron en RStudio y VOSviewer. Como resultado, encontramos que la producción de artículos sobre el tema estudiado en los últimos años ha crecido exponencialmente en ambas bases de datos. Las principales tecnologías incluidas en el proceso de fabricación estaban relacionadas con la inteligencia artificial y el big data. Los artículos más citados indican que la fabricación inteligente está adquiriendo una gran relevancia en la optimización de procesos. Este análisis bibliométrico sugiere que la inserción de la Industria 4.0 en las organizaciones tiene un impacto positivo en la toma de decisiones, mejorando la orientación de la gestión empresarial.

Develop of a cooling system using solar energy for the artisanal fishing industry

Desarrollo de un sistema de refrigeración mediante energía solar para la industria pesquera artesanal

R García¹, S García², A Espeleta², L Pimienta², and F Narváez²

¹ Universidad Francisco de Paula Santander, Ocaña, Colombia

² Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia

E-mail: fnarvaez@unimagdalena.edu.co

Abstract. Fishing activities require optimal fish conservation conditions in order to reduce their deterioration in such a way that their quality is maintained within the supply chain. The present work intends to guarantee the conservation of the catch obtained in tasks aboard artisanal parguera boats in the Taganga area in the city of Santa Marta, through the calculation and design of a prototype of an autonomous cold conservation system, using renewable energies. The field activity of the model boat was carried out at the Universidad del Magdalena. In this way, a refrigeration system capable of achieving a drop in seawater temperature between 0 °C and -1.5 °C was built. The proportional–integral–derivative controller was produced in order to monitor the refrigeration system remotely. The total estimated load for the hold of the vessel used for cooling seawater is 0.86 TR and, with an economic analysis of the costs of equipment and assembly of the project, the estimated value is \$20,440,460 Colombian pesos and its impact on the price of the product is estimated at \$228.54 Colombian pesos/Kg.

Resumen. Las actividades pesqueras requieren de unas condiciones óptimas de conservación de los peces para reducir su deterioro de forma que se mantenga su calidad dentro de la cadena de suministro. El presente trabajo pretende garantizar la conservación de la captura obtenida en faenas a bordo de lanchas pargueras artesanales en la zona de Taganga de la ciudad de Santa Marta, mediante el cálculo y diseño de un prototipo de sistema autónomo de conservación en frío, utilizando energías renovables. La actividad de campo del modelo de barco se realizó en la Universidad del Magdalena. De esta forma, se construyó un sistema de refrigeración capaz de lograr un descenso de la temperatura del agua de mar entre 0 °C y -1,5 °C. El controlador proporcional, integral y derivativo fue producido para monitorear el sistema de refrigeración de forma remota. La carga total estimada para la bodega de la embarcación utilizada para el enfriamiento de agua de mar es de 0,86 TR y, con un análisis económico de los costos de equipamiento y montaje del proyecto, el valor estimado es de \$2'044.0460 pesos colombianos y su impacto en el precio del producto es estimado en \$228,54 pesos colombianos/Kg.

Experimental evaluation of cutting forces for tire recycling tools

Evaluación experimental de las fuerzas de corte para herramientas de reciclaje de neumáticos

L J Cárdenas Flechas¹, L A Terán Llorente¹, L F Ruiz Pineda¹, and D Hincapié Ladino¹

¹ Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia

E-mail: duberney.hincapie@profesores.uamerica.edu.co

Abstract. The management of used tires and their waste is a problem that must be addressed in a comprehensive and sustainable manner, considering all aspects related to their design, manufacturing, and final use. In turn, transportation and cutting are key issues in the tire recycling process, seeking to minimize the amount of waste generated and establish new uses for recovered materials. Therefore, in this study, the shear stresses and shear forces for a blade profile commonly used in the processing of this type of materials were experimentally evaluated. These data will be used for the validation of numerical models used in the determination of the most suitable blade profile.

Resumen. La gestión de los neumáticos usados y sus residuos es un problema que debe abordarse de manera integral y sostenible, considerando todos los aspectos relacionados con el diseño, la fabricación y el uso final de los mismos. A su vez, el transporte y el corte, son problemas clave en el proceso de reciclaje de neumáticos, en donde se busca minimizar la cantidad de residuos generados y establecer nuevos usos para los materiales recuperados. En base a lo anterior, en el presente trabajo se evaluaron experimentalmente los esfuerzos de corte y las fuerzas de corte para un perfil de cuchilla habitualmente usado en el procesamiento de este tipo de materiales. Dichos datos servirán para la validación de modelos numéricos usados en la determinación del perfil de cuchillas más adecuados.

Hybrid kinematic simulation of human gait pattern for different velocities

Simulación cinemática híbrida del patrón de marcha humana considerando diferentes velocidades

L Izquierdo Córdoba¹, D Amaya Hurtado², and J M Rosário³

¹ Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia

² Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia

³ Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brazil

E-mail: rosario@fem.unicamp.br

Abstract. The purpose is to propose a hybrid kinematic model of a serial biped robotic mechanism that can simulate human gait in the sagittal plane while considering four different velocity patterns. To achieve this, we conduct a thorough biomechanical analysis of human gait movements. Specifically, we consider the lower limbs as kinematic chains that are composed of joints and rigid links. To obtain the necessary data for our analysis, we employ a sophisticated tracking system that records the angular trajectories and XY positions of the hip, knee, and ankle joints. This procedure was carried out at the Laboratory of Instrumentation for Biomechanics at the Faculty of Physical Education at the Universidade Estadual de Campinas. We collected data for four different walking speeds, which enables us to simulate the effects of age or pathological disturbance on gait. By using this dataset, we can accurately generate the velocity patterns required for our hybrid kinematic model. We use an iterative numerical method to simulate the hybrid kinematic model and solve the inverse kinematic problem, which generates the desired trajectories in joint space. Additionally, we incorporate a finite state machine (FSM) to describe the variable event-based gait model. One of the initial steps in gait modeling is identifying the main events that occur during the gait cycle, such as heel strike and toe-off, which serve as key reference points for subsequent analysis. To detect these events, we use various data sources, including kinetic and/or kinematic data, which provide information on the forces and movements acting on the body during gait. The simulation is performed in Matlab/Simulink using the Stateflow library, where the Gait desired velocity is the event that determines the switching between finite state machines for each velocity pattern. Continuous dynamics play a crucial role in gait modeling, as they describe the temporal evolution of physical variables, such as joint angles and ground reaction forces, throughout the gait cycle. On the other hand, event dynamics typically govern abrupt changes in the behavior of the system, such as the initiation of the swing phase or a change in walking speed. Based on the hybrid dynamic modeling, it is possible to design a control architecture for a lower limb exoskeleton during a gait cycle, structured as a hierarchical system. The decision layer, located at the uppermost level, includes a discrete event controller, which in this case corresponds to a finite state machine. The lower layer comprises a continuous joint-level controller, which can be implemented as a proportional–integral–derivative controller to accurately track the reference angular trajectory in the respective degree of freedom of the lower limb. This proposed architecture allows for effective control of the exoskeleton's motion, providing precise and reliable assistance during gait rehabilitation. Our results demonstrate that hybrid modeling provides significant advantages in modeling robotic systems, such as exoskeletons or biped robots. It allows for the consideration of discontinuities and the ability to adapt the gait pattern in real-time with variable velocity. In future work, this approach will help us incorporate advanced machine learning algorithms to further enhance the exoskeleton's performance and adaptability to varying patient needs.

Resumen. Este artículo propone un modelo cinemático híbrido de un mecanismo robótico serial bípedo para simular la marcha humana en el plano sagital al considerar cuatro patrones de velocidad diferentes. Para lograr esto, el análisis biomecánico de los movimientos de la marcha humana considera las extremidades inferiores como cadenas cinemáticas compuestas por articulaciones y eslabones rígidos. Para obtener los datos necesarios para nuestro análisis, utilizamos un sofisticado sistema de seguimiento que registra las trayectorias angulares y las posiciones XY de las articulaciones de la cadera, la rodilla y el tobillo. Este procedimiento se llevó a cabo en el Laboratorio de Instrumentación para la Biomecánica de la Facultad de Educación Física de la Universidade Estadual de Campinas. Recolectamos datos para cuatro velocidades diferentes de marcha, lo que nos permite simular los efectos de la edad o algunos trastornos patológicos en la marcha. Utilizando este conjunto de datos, podemos generar con precisión los patrones de velocidad necesarios para nuestro modelo cinemático híbrido. Utilizamos un método numérico iterativo para simular el modelo cinemático híbrido y resolver el problema cinemático inverso, que genera las trayectorias deseadas en el espacio articular. Además, incorporamos una máquina de estados finitos para describir el modelo de marcha basado en eventos variables. Uno de los primeros pasos en el modelado de la marcha es identificar los principales eventos que ocurren durante el ciclo de la marcha, como el impacto del talón y la separación del pie, que sirven como puntos de referencia clave para el análisis posterior. Para detectar estos eventos, utilizamos diversas fuentes de datos, incluyendo datos cinéticos y/o cinemáticos, que proporcionan información sobre las fuerzas y los movimientos que actúan sobre el cuerpo durante la marcha. La simulación se realiza en Matlab/Simulink® utilizando la librería Stateflow®, donde la velocidad deseada de la marcha es el evento que determina el cambio entre los estados de la máquina de estados finitos para cada patrón de velocidad. La dinámica continua juega un papel crucial en el modelamiento de la marcha, ya que describe la evolución temporal de las variables físicas, como los ángulos de las articulaciones y las fuerzas de reacción del suelo, a lo largo del ciclo de la marcha. Por otro lado, la dinámica de eventos gobierna típicamente los cambios abruptos en el comportamiento del sistema, como el inicio de la fase de apoyo u oscilación, o un cambio en la velocidad de la marcha. Basándonos en el modelo dinámico híbrido, es posible diseñar una arquitectura de control para un exoesqueleto de miembro inferior durante un ciclo de marcha, estructurada como un sistema jerárquico. La capa de decisión, ubicada en el nivel superior, incluye un controlador por eventos discretos, que en este caso corresponde a una máquina de estados finitos. La capa inferior comprende un controlador continuo a nivel de articulación, que puede implementarse como un controlador proporcional-integral-derivativo para seguir con precisión la trayectoria angular de referencia en el grado de libertad respectivo del miembro inferior. Nuestros resultados demuestran que el modelamiento híbrido proporciona ventajas importantes para modelar sistemas robóticos como los exoesqueletos, ya que permite considerar discontinuidades y posibilidades de adaptar el patrón de marcha en tiempo real con velocidad variable. En un próximo trabajo, este enfoque nos ayudará a crear una lógica sencilla para integrar algoritmos de inteligencia artificial para la adaptación del patrón de marcha en función de la superficie sobre la cual se realiza, sin necesidad de instrumentación compleja.

Numerical analysis of sharpening profiles for tire recycling cutting tools

Análisis numérico de los perfiles de afilado para herramientas de corte en el reciclaje de neumáticos

L J Cárdenas Flechas¹, D Hincapié Ladino¹, L F Ruiz Pineda¹, and L A Terán Llorente¹

¹ Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia

E-mail: leonel.teran@profesores.uamerica.edu.co

Abstract. Recycling end-of-life tires is a major challenge in waste management, as tires are not biodegradable and, if not adequately treated, can cause problems for human health and the environment. The transfer of end-of-life tires from waste collection points to recycling facilities is one of the main problems in the recycling process, since as an entire piece, they occupy a large volume, representing high costs and delays in transportation. Therefore, a possible solution is to carry out a pre-cutting process at the collection points to reduce the volume and facilitate transportation. Cutting processes play an essential role, so the devices used in this operation must be efficient to maintain the minimum energy consumption. In this study, several blade profiles are numerically evaluated to find the most efficient one regarding the required cutting force of the tire tread. Then, the cutting edge of the best profile is analyzed to estimate its wear rate based on a simple fatigue failure criterion, to recommend the frequency of blade sharpening.

Resumen. El reciclaje de neumáticos fuera de uso es un reto importante en la gestión de residuos, ya que estos no son biodegradables y, si no se tratan adecuadamente, pueden causar problemas para la salud humana y el medio ambiente. El traslado de los neumáticos desde los puntos de recogida de residuos hasta las instalaciones de reciclado es uno de los principales problemas del proceso de reciclado, ya que estos ocupan un gran volumen cuando están completos, lo que supone costos elevados y retrasos en el transporte. Por ello, una posible solución es realizar un proceso de pre-corte en los puntos de recogida para reducir el volumen y facilitar el transporte. Los procesos de corte juegan un papel esencial, por lo que los dispositivos utilizados en esta operación deben ser eficientes para mantener el mínimo consumo energético. Por lo tanto, en este estudio, se evalúan numéricamente varios perfiles de afilado de cuchilla para encontrar el más eficiente en cuanto a la fuerza de corte requerida en la banda de rodadura del neumático. Seguidamente, se analiza el filo de corte del mejor perfil para estimar su tasa de desgaste basándose en un criterio simple de fallo por fatiga, con el fin de recomendar una frecuencia de afilado.

Strengthening of the productive chain of sacha inchi in the ancestral Kite Kiwe community: analysis of planting and transformation into derived products

Fortalecimiento de la cadena productiva del sacha inchi en la comunidad ancestral Kite Kiwe: análisis de la siembra y la transformación en productos derivados

I M Fernández¹

¹ Fundación Universitaria de Popayán, Popayán, Colombia

E-mail: ingrid.fernandez@docente.fup.edu.co

Abstract. Sacha inchi (*Plukenetia volubilis*) is an oilseed plant with great agro-industrial potential, which has been widely used as food by communities in the Latin American Amazon. Its cultivation has expanded in recent years due to its nutritional value and potential in the food and cosmetics market, due to its high concentration of proteins, vitamins, antioxidants, and omegas 3, 6 and 9. The Kite Kiwe ancestral community located in the municipality of Timbío in the department of Cauca, Colombia, currently processes this seed in an artisan way under their cultural traditions. Thus, the objective of this work was focused on determining the parameters for the standardization of sacha inchi planting and harvesting in this region and establishing the transformation route of the raw material into oil, as well as identifying the possible uses of the derived products. A bibliographical review was carried out on the methods of harvesting and harvesting sacha inchi, the specific parameters were defined in each stage, analyzing the methods used by different farmers, articulating it to the process carried out in the community, the steps for oil extraction were found. of the seed according to different methods and possible derived products will be used.

Resumen. El sacha inchi (*Plukenetia volubilis*) es una planta oleaginosa, con gran potencial agroindustrial, que ha sido ampliamente utilizada en la alimentación por las comunidades de la Amazonia latinoamericana, su cultivo se ha expandido en los últimos años debido a su valor nutricional y a su potencial comercial en el mercado de alimentos y cosméticos, por su alta concentración de proteínas, vitaminas, antioxidantes y omegas 3, 6 y 9. La comunidad ancestral Kite Kiwe ubicada en el municipio de Timbío en el departamento del Cauca, Colombia, actualmente procesa esta semilla de manera artesanal bajo sus tradiciones culturales. Así, el objetivo de este trabajo se enfocó en determinar los parámetros para la estandarización del proceso de siembra y cosecha de sacha inchi en esta región y establecer la ruta de transformación de la materia prima en aceite, además en identificar los posibles usos de los productos derivados. Se realizó una revisión bibliográfica sobre los métodos de siembra y cosecha de sacha inchi, se establecen los parámetros específicos en cada etapa, analizando los métodos utilizados por diferentes agricultores articulándolo al proceso llevado a cabo en la comunidad, se establecieron los pasos para la extracción de aceite de la semilla según diferentes métodos y se reconocen posibles productos derivados.

Water desalination plants an emergency alternative in educational institutions of La Guajira, Colombia

Planta desalinizadora de agua como alternativa de emergencia en instituciones educativas de La Guajira, Colombia

Y Y Ríos Díaz¹, A V Garnica², M S Díaz Márquez², J P Prioló², and G Carrillo Caballero²

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

² Universidad Tecnológica de Bolívar, Cartagena de Indias, Colombia

E-mail: gcarricaballero3@hotmail.com

Abstract. The supply of potable water is a global challenge, especially in coastal regions such as the Atlantic coast of Colombia, La Guajira, and Magdalena, where water scarcity is a constant problem affecting children and young people, limiting schools in the region from providing basic hygiene and food services, causing infections and, in most cases, absence of students in educational institutions. In this regard, this project proposes the development of a water desalination plant that functions as an emergency alternative for obtaining potable water from seawater. Solar distillation technology presents an effective solution to this problem of desalinating water, as it uses the energy from the sun to evaporate water and separate it from its salts and other contaminants. The proposed solar desalination system consists of a parabolic dish solar concentrator built with mirrors and an aluminum receiver, a reactor where heat transfer occurs. Water vapor is obtained thanks to the temperature increase on the surface by solar radiation. This system aims to produce a maximum of 1000 liters of water for common uses per day, making it an efficient and cost-effective alternative for educational institutions with fewer students and difficulties in the water supply. This solar distillation technology is selected because the area where the project is developed, in this case, La Guajira, has a great energy potential in using solar radiation as a constant and accessible renewable energy source of 4.5 Kilowatts per square meter on average per day. The solar distillation process is safe and easy to use, making it suitable for supplying potable water in remote regions or emergencies. The solar desalination system has three subsystems that contribute to process efficiency: A heat exchanger system that accelerates the cooling process of the already distilled water vapor to obtain a greater liquid flow A fluid distribution system A level control system that ensures the proper water level in the reactor to optimize distilled water production A modular approach is used to construct the solar desalination system prototype, as it facilitates manufacturing and transport. Additionally, the prototype uses materials resistant to corrosion and weathering to ensure the system's durability in the marine environment. The structure of the parabolic disc concentrator is a galvanized 14-gauge wire mesh on which mirrors are used to reflect the sun's rays onto the copper receiver. To ensure remote monitoring and operation of the system, field, and control devices are employed to measure variables correctly and adjust flow and pressure values at different points in the system. This strategy allows for early detection of failures and preventive system maintenance. Once the prototype is built and tested, its efficiency, performance, and operating costs are evaluated to optimize the system's design and prepare its implementation on a large scale in the Colombian Caribbean region. Then, the system's scalability is sought by using the relationship between the solar collector's surface, the amount of water that can be desalinated per day, and the relationship between the cost of materials and the system's production capacity. It is expected that the large-scale implementation of a solar desalination system will significantly improve access to potable water in the Colombian Caribbean region, especially in areas where water supply is limited or nonexistent. Furthermore, this renewable and sustainable technology can help reduce dependence on non-renewable energy sources such as fossil fuels and promote the development of clean and environmentally friendly technologies.

Resumen. El suministro de agua potable es un desafío global y especialmente en regiones costeras como la costa atlántica de Colombia, La Guajira y Magdalena, donde la escasez de agua es un problema constante que afecta a niños y jóvenes, limitando a los colegios de la región a prestar los servicios básicos de higiene y alimentación, ocasionando infecciones y en la mayoría de los casos ausencia de los estudiantes en los planteles educativos. En este sentido, el presente proyecto propone el desarrollo de una planta desalinizadora de agua que funcione como una alternativa de emergencia para la obtención del agua potable a partir de agua de mar. La tecnología de destilación solar se presenta como una solución eficaz a esta problemática para desalinizar agua, ya que utiliza la energía del sol para evaporar el agua y separarla de sus sales y otros contaminantes. El sistema de desalinización solar propuesto consta de un concentrador solar de disco parabólico, construido mediante espejos, y un receptor de aluminio que funciona como un reactor donde ocurre la transferencia de calor y se obtiene vapor de agua gracias al aumento de temperatura en la superficie por la radiación solar. Este sistema tiene como objetivo producir un máximo de 1000 litros de agua para usos comunes al día, lo que lo convierte en una alternativa eficiente y económica para las instituciones educativas con un número reducido de estudiantes y dificultades en el abastecimiento de agua. La selección de esta tecnología de destilación solar se debe a que la zona donde se desarrolla el proyecto, en este caso la Guajira, cuenta con un gran potencial energético en el uso de la radiación solar como fuente de energía renovable, constante y gratuita de 4,5 kilovatios sobre metro cuadrado en promedio por día, el proceso de destilación solar es seguro y fácil de usar, lo que lo hace adecuado para suministrar agua potable en regiones remotas o en situaciones de emergencia. El sistema de desalinización solar cuenta con tres subsistemas que contribuyen a la eficiencia del proceso: un sistema de intercambiador de calor, que acelera el proceso de enfriamiento del vapor de agua ya destilado para obtener un mayor flujo de líquido, un sistema de distribución del fluido y un sistema de control de nivel, que se encargan de mantener el nivel adecuado de agua en el reactor para optimizar la producción de agua destilada. Para la construcción del prototipo del sistema de desalinización solar, utiliza un enfoque modular, ya que facilita la fabricación y el transporte, además, el prototipo utiliza materiales resistentes a la corrosión y a la intemperie para garantizar la durabilidad del sistema en el ambiente marino. La estructura del concentrador de disco parabólico es un tejido de alambre calibre 14 galvanizado sobre el cual se emplean espejos que reflejan los rayos del sol hacia el receptor de cobre. Para garantizar el monitoreo y operación remoto del sistema se emplean dispositivos de campo y control que permiten la correcta medición de las variables, además de ajustar el valor del flujo y presión en diferentes puntos del sistema. Lo anterior, permite la detección temprana de fallas y por consiguiente el mantenimiento preventivo del sistema. Una vez construido y probado el prototipo, se llevará a cabo una evaluación de su eficiencia, rendimiento y costos de operación, con el objetivo de optimizar el diseño del sistema y preparar su implementación a gran escala en la región caribe colombiana. Para lograr esto se busca la escalabilidad del sistema usando la relación entre la superficie del colector solar y la cantidad de agua que se puede desalinizar por día, y la relación entre el costo de los materiales y la capacidad de producción del sistema. Se espera que la implementación a gran escala del sistema de desalinización solar tenga un impacto significativo en la mejora del acceso al agua potable en la región caribe colombiana, especialmente en áreas donde el abastecimiento de agua es limitado o inexistente. Además, el uso de esta tecnología renovable y sostenible puede contribuir a reducir la dependencia de fuentes de energía no renovables, como los combustibles fósiles, y fomentar el desarrollo de tecnologías limpias y amigables con el medio ambiente.

7TH

INTERNATIONAL MEETING FOR RESEARCHERS IN

MATERIALS

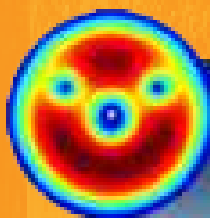
& PLASMA

TECHNOLOGY - IMRMPT

Partners Sponsors

IOP
science

nano4ENERGY



Grupo
de Física
Mesoscópica



Foristom
Foundation



CIMBIOS