



ISMaS 2025
INTERNACIONAL
SYMPOSIUM ON
MATERIALS SCIENCE



LIBRO DE RESUMENES

II SIMPOSIO INTERNACIONAL DE CIENCIA DE MATERIALES

Contenido

Conferencias plenarias	1
CRECIMIENTO DE NANOESTRUCTURAS DE ÓXIDOS METÁLICOS MEDIANTE OXIDACIÓN TÉRMICA POR CALENTAMIENTO JOULE.....	1
DEVELOPING INNOVATIVE NEREA® TECHNOLOGY FOR THE INDUSTRIAL PRODUCTION OF NEW ZEOLITIC SUBSTRATES, FERTILIZERS AND PESTICIDES FOR SUSTAINABLE AGRICULTURE BASED ON NATURAL ZEOLITE ENGINEERING	2
PEROVSKITE OXIDES FOR PHOTOCHEMISTRY AND ELECTROCHEMISTRY	3
Comisión: Nanociencia y ciencias de materiales	4
Conferencias invitadas	4
PHYSICS AND CHEMISTRY ON THE NANOSCALE.....	4
INNOVACIONES DEL CENTRO DE BIOMATERIALES EN EL CAMPO DE LOS PRODUCTOS DE USO ESTOMATOLÓGICO / BIOMATERIALS CENTER INNOVATIONS IN THE FIELD OF DENTAL PRODUCTS.....	5
Presentaciones orales	6
MAESTRÍA EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE LOS MATERIALES: UNA OPORTUNIDAD PARA LA FORMACIÓN DE POSGRADO EN MATERIALES	6
THE STRUCTURE-GIVING ROLE OF Rb ⁺ IONS FOR WATER-ICE NANOISLANDS SUPPORTED ON Cu(111)	7
HYBRID MATERIALS BASED A NATURAL RESOURCE FOR SKIN CARE: BENTONITE/VITAMIN C AND BENTONITE/METFORMIN	8
NATURAL CLAY/POLYMER FILMS BY THE CASTING METHOD	9
NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS CON POTENCIALES APLICACIONES EN LA REMOCIÓN DE IBUPROFENO	10
DEPOSICIÓN BIOMIMÉTICA ACELERADA DE HIDROXIAPATITAS DOPADAS CON CINC SOBRE POLIETERETERCETONA (PEEK)	11
DEPOSICIÓN BIOMIMÉTICA ACELERADA DE HIDROXIAPATITAS E HIDROXIAPATITAS DOPADAS CON ESTRONCIO SOBRE TITANIO	12
POLÍMERO DE IMPRESIÓN MOLECULAR TIPO ACRÍLICO EN EL DESARROLLO DE ELECTRODOS SENSIBLES A IONES GLUTAMATO	13
COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES, EVALUACIÓN SENSORIAL Y TIPO DE RON.....	14
OBTAINING ZnO NANOPARTICLES BY AQUEOUS SYNTHESIS: A COMPARISON OF THREE METHODS.....	15

SÍNTESIS DEL NANO-TiO ₂ ELECTROLÍTICO. NUESTRAS EXPERIENCIAS COMO BACTERICIDA.....	16
BIMETALLIC Cu ²⁺ -Zn ²⁺ SYSTEM ON CLINOPTILOLITE: ION-EXCHANGE SELECTIVITY AND CATALYTIC ACTIVITY IN NO-REDUCTION.	17
MODIFYING OPTICAL PROPERTIES OF AZO THIN FILMS FABRICATED BY RF-SPUTTERING WITH TWIST SUBSTRATE-ASSISTED GLAD	18
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR NANOESTRUCTURADO Fe ₃ O ₄ @SiO ₂ @Cu ₂ O	19
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE ZINC Y ÓXIDO DE COBRE (II) CON POTENCIALES APLICACIONES EN LA AGRICULTURA	20
EL PAPEL DE LA CARGA DE LA ARCILLA EN LA MOVILIDAD DE LOS CATIONES DE COMPENSACIÓN: UNA APROXIMACIÓN DESDE LA DINÁMICA MOLECULAR.....	21
ESTUDIO MEDIANTE EL DFTB+ DE LA ESTABILIDAD Y PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE NANOCEBOLLAS DE CARBONO CON DEFECTOS PUNTUALES PRODUCTO DE LOS PROCESOS DE IRRADIACIÓN	22
ADSORCIÓN DE PLATINO(II) EN LA ZEOLITA CUBANA (SAN ANDRÉS) EN MODO DINÁMICO.....	23
Carteles	24
ESTUDIO DE LA FLUORESCENCIA DE PUNTOS CUÁNTICOS DE TELURO DE CADMIO (QDs-CdTe) ESTABILIZADOS CON L-CISTEÍNA BAJO DIFERENTES CONDICIONES DE SÍNTESIS.....	24
OBTENCIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CdSe MEDIANTE LA SÍNTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS	25
ESTUDIO DE PRUEBAS DE CONCEPTO PARA LA FUNCIONALIZACIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CdTe/ZnS EN APLICACIONES BIOLÓGICAS	26
EFFECTOS DE LA INCORPORACIÓN DE CROMO EN EL ANCHO DE LA BANDA PROHIBIDA DE NANOESTRUCTURAS CRISTALINAS DE ZnO.....	27
LA ESPECTROSCOPIA DE FOTO VOLTAJE SUPERFICIAL PARA LA CARACTERIZACIÓN DE NANOHILOS DE ZnO	28
OBTENCIÓN DE UN SISTEMA NANOESTRUCTURADO BASADO EN ALBÚMINA SÉRICA HUMANA PARA SU EMPLEO EN LA TERAPIA CONTRA EL CÁNCER	29
EMPLEO DE DIFERENTES MÉTODOS PARA OBTENER CÁPSULAS POLIMÉRICAS COMO PLATAFORMAS DE LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS.....	30
CUBAN NANOMATERIALS: APPLICATIONS IN MEDICINE AND THE ENVIRONMENT	31
MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF CLAY DESHIDRATATION PROCESS ..	32
FIRST STEPS IN CATION EXCHANGE IN CLAYS: AN APPROACH FROM MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS	33

ESTUDIO TEÓRICO DE LAS INTERACCIONES EN EL SISTEMA COMPUESTO LITIO-FLUORHECTORITA-TRIMETOPRIM POR DINÁMICA MOLECULAR	34
1-(2-FUROYL)THIOUREAS 3-CICLOPROPYL AND 3,3-DIETHYL SUBSTITUTED: PRELIMINARY THEORETICAL STUDY ON THEIR RECOGNITION OF Pb ²⁺ IONS.....	35
EMISIÓN ELECTRÓNICA EN SUPERFICIES CATÓDICAS DE TUNGSTENO CONTAMINADAS CON CARBONO Y OXÍGENO MEDIANTE EL PROGRAMA SIESTA	36
PREPARACIÓN DE CAPAS DELGADAS Y HETEROESTRUCTURAS DE ÓXIDOS DE MOLIBDENO	37
CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS OF 2-(3'-NITROPHENYL)-BENZIMIDAZOLE	38
ESTUDIO DE LA EMISIÓN ELECTRÓNICA DEBIDO A LA CONTAMINACIÓN NO HOMOGÉNEA DE CARBONO EN LA SUPERFICIE DE CÁTODOS DE TUNGSTENO.	39
INFLUENCIA DE LA RADIACIÓN GAMMA EN LAS PROPIEDADES ÓPTICAS DE PUNTOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO	40

Comisión: Materiales para la sostenibilidad y aplicaciones medioambientales 41

Conferencias invitadas	41
CLAY-POLYMER FILMS FOR SUSTAINABLE FOOD PACKAGING.....	41
NEREA® ZEOLITIC NANOSTRUCTURED MATERIALS vs NPK FERTILIZER MIXED WITH NATURAL ZEOLITES.....	42
Presentaciones Orales	43
INFLUENCIA DE LA CRISTALINIDAD DE LA DIFURFURILIDENTRIUREA EN LA FERTILIZACIÓN DEL CULTIVO DE TOMATE	43
DESARROLLO DE BIOFERTILIZANTES DE LIBERACIÓN LENTA A PARTIR DE LA MICROALGA SPIRULINA PARA UNA AGRICULTURA ECOLÓGICA	44
OBTENCIÓN DE NANOCOMPÓSITOS SÍLICE-LIGNINA A PARTIR DE CÁSCARA DE ARROZ Y PERGAMINO DE CAFÉ COMO ADSORBENTES DE METALES PESADOS	45
CARACTERIZACIÓN PRELIMINAR DE RESIDUOS DE CAFÉ CUBANO: UNA OPORTUNIDAD PARA LA INNOVACIÓN SOSTENIBLES.....	46
OBTENCIÓN Y COMPARACIÓN ESTRUCTURAL DE NANOPARTÍCULAS DE LIGNINA OBTENIDAS A PARTIR DE LOS RESIDUOS DEL CAFÉ	47
LA ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCENCIA APLICADA A LA DETECCIÓN DE LESIONES DERMATOLÓGICAS. ASPECTOS A CONSIDERAR PARA EL DESARROLLO DE UNA TECNOLOGÍA PROPIA.....	48
DESARROLLO DE UN EMISOR BLANCO-UV CON CONTROL LED POR ARDUINO PARA DIAGNÓSTICOS DERMATOLÓGICOS	49

EVALUACIÓN DEL “CONVERTIDOR LUZ A DIGITAL” MONOLÍTICO, DE BAJO COSTO, TCS3400, PARA LA DETECCIÓN DE AUTOFLUORESCENCIA EN LESIONES DERMATOLÓGICAS	50
IMPLEMENTACIÓN DE UN SISTEMA PARA LA CARACTERIZACIÓN DE LED CON APLICACIONES EN FOTOMEDICINA	51
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BIOPOLÍMEROS DE ALGINATO DE SODIO	52
CLINOPTILOLITA NATURAL MODIFICADA COMO CATALIZADOR FOTO-FENTON CON LUZ VISIBLE EN LA INACTIVACIÓN DE <i>E. COLI</i>	53
ESTUDIO DE REMOCIÓN DE NÍQUEL (II) CON ZEOLITA NATURAL CUBANA EN MODO DINÁMICO.....	54
OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LA BIOMASA INMOVILIZADA EN ZEOLITA CUBANA DE SAN ANDRÉS, PARA LA REMOCIÓN DE Pt(II)	55
BENTONITAS CUBANAS MODIFICADAS: CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y MICROBIOLÓGICA	56
EVALUACIÓN DE ELECTRODOS IMPRESOS MODIFICADOS CON NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE ZINC EN LA CUANTIFICACIÓN DEL COLESTEROL LIBRE	57
PAST, PRESENT AND PERSPECTIVES OF THE USE AND DEVELOPMENT OF ION AND ELECTRON ACCELERATORS BASED ANALYTICAL METHODS FOR MATERIALS CHARACTERIZATION AT THE UNIVERSITY OF HAVANA.....	58
CLASIFICACIÓN DE MUESTRAS DE TABACO MEDIANTE ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES, ANÁLISIS DISCRIMINANTE LINEAL Y FLUORESCENCIA DE RAYOS X.....	59
PARTICULARIDADES DEL ANÁLISIS ELEMENTAL DE RON MEDIANTE ESPECTROSCOPIA DE EMISIÓN Y ABSORCIÓN ATÓMICA	60
Carteles	61
ESTABILIDAD ESTRUCTURAL DE MATERIALES ZEOLÍTICOS CON Ni-Co COMO CATALIZADORES DE BAJO COSTO PARA HIDROGENACIÓN SELECTIVA DE CITRAL.....	61
CATALIZADORES ZEOLÍTICOS PARA LA DEGRADACIÓN DE COLORANTES EN AGUA MEDIANTE UN PROCESO FOTO-FENTON CON LUZ VISIBLE	62
EVALUACIÓN DE LA HALLOYSITA COMERCIAL Y UNA ZEOLITA DERIVADA DE LA HALLOYSITA PARA LA SEPARACIÓN DE PROPANO/PROPILENO Y CAPTURA DE CO ₂	63
ZEOLITAS SINTÉTICAS OBTENIDAS A PARTIR DE CENIZAS DE CÁSCARA DE ARROZ Y SU EVALUACIÓN EN LA REMOCIÓN DE IONES COBRE	64
CARACTERIZACIÓN DE <i>THALASSIA TESTUDINUM</i> COMO SORBENTE EN LA EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA DE Cu(II).....	65

ESTUDIO PRELIMINAR DE UN POLÍMERO DE IMPRESIÓN MOLECULAR TIPO ACRÍLICO COMO RECEPTOR DE FÁRMACOS	66
CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDOS Y DEPÓSITOS EN ENSAYOS ACELERADOS A PARTIR DE CENIZAS SIMULADAS	67
SEM CHARACTERIZATION OF CONCRETES WITH BLAST FURNACE SLAG OF THE CUBAN STEEL INDUSTRY	68
ESPECTROSCOPIA FTIR COMO HERRAMIENTA EN EL CONTROL DE CALIDAD DE LOS PRODUCTOS ZEOLÍTICOS NEREA®	69
ESTUDIO DE MATERIALES QUE COMPONEN EL MORTERO DE LA FUENTE DE LA SAMARITANA	70
IDENTIFICACIÓN DE PIGMENTOS DE OBRAS PATRIMONIALES MEDIANTE FLUORESCENCIA DE RAYOS X.....	71
TAMIZAJE QUÍMICO E IDENTIFICACIÓN DE METABOLITOS SECUNDARIOS BIOACTIVOS A PARTIR DE <i>TRICHODERMA</i> SPP	72
RECUPERACIÓN DE ESPECTROFOTÓMETRO UV – VISIBLE SPECTRONIC 20 D+	73
RECUPERACIÓN Y AUTOMATIZACIÓN DE EQUIPOS UTILIZANDO LA PLATAFORMA ARDUINO	74
CONSTRUCCIÓN DE BRAZO REGULABLE PARA PLOTTER XY.....	75
Comisión: Materiales para la conversión y almacenamiento de energía... 76	
Conferencia invitada	76
MATERIALS AND INTERFACES IN SOLID-STATE BATTERIES	76
Presentaciones orales	77
DIELECTRIC AND PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF LEAD-FREE FERROELECTRIC CERAMICS PRODUCED BY HIGH-POWER ULTRASOUND TECHNIQUE.....	77
PANORÁMICA DE LA OBTENCIÓN DE TiO ₂ POR VÍA ELECTROLÍTICA.....	78
OBTENCIÓN DE TiO ₂ NANOESTRUCTURADO A PARTIR DE TITANIO RECICLADO PARA SU APLICACIÓN COMO FOTOELECTRODO.....	79
CO-DOPAJE ESTRUCTURAL DEL NMC111 CON HIERRO Y FÓSFORO PARA BATERÍAS DE ION LITIO	80
EFECTOS DE LA RADIACIÓN GAMMA DE ⁶⁰ Co EN LOS MATERIALES CATÓDICOS PARA BATERÍAS DE LITIO LNMO Y LMO.....	81
PREPARACIÓN EN MEDIO ACUOSO DE RECUBRIMIENTOS AMORFOS DE TiO ₂ SOBRE PARTÍCULAS DE LNMO.....	82
DESARROLLO DE FUNCIONALIDAD MAGNÉTICA EN ESPINELAS LNMO CO-DOPADAS PARA CÁTODOS DE BATERÍAS MAGNETO-ASISTIDAS	83

COMPORTAMIENTO ESTRUCTURAL, DIELECTRICO Y DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA DEL SISTEMA CERÁMICO $(\text{Pb}_{0.97}\text{La}_{0.02})(\text{Zr}_{0.80}\text{Sn}_{0.12}\text{Ti}_{0.08})\text{O}_3$ QUE MUESTRA DOS FASES ANTIFERROELÉCTRICAS.....	84
Carteles	85
MAGNETIC STUDY OF WIDE-RANGE RARE EARTH SUBSTITUTION IN BaM HEXAFERRITE.....	85
VARIACIONES EN LA ENTROPÍA MAGNÉTICA EN EL SISTEMA MULTIFERROICO $\text{Bi}_5\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Ti}_3\text{O}_{15}$ DOPADO CON TIERRAS RARAS EN EL RANGO DE BAJAS TEMPERATURAS	86
EFFECT OF THICKNESS ON MORPHOLOGICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED ZnO THIN FILMS DEPOSITED BY ULTRASONIC SPRAY PYROLYSIS	87
OBTENCIÓN DE PELÍCULA DE CuO NANOESTRUCTURADA SOBRE VIDRIOS CONDUCTORES FTO E ITO A TRAVÉS DE LA TÉCNICA DE BAÑO QUÍMICO ACTIVADO POR MICROONDAS	88
FABRICATION AND CHARACTERIZATION OF PbS THIN FILM FOR SOLAR CELL APPLICATION	89

Conferencias plenarias

CRECIMIENTO DE NANOESTRUCTURAS DE ÓXIDOS METÁLICOS MEDIANTE OXIDACIÓN TÉRMICA POR CALENTAMIENTO JOULE

Javier Piqueras

Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Física de Materiales, Madrid, España.

E-mail: piqueras.javier@ucm.es

RESUMEN:

Varios métodos térmicos como la oxidación de metales por calentamiento en aire o los métodos basados en la evaporación térmica, como vapor-sólido (V-S) o vapor-líquido-sólido (V-L-S) se utilizan con frecuencia para crecer nanohilos y otras nanoestructuras de óxidos metálicos. En estos métodos suelen ser necesarios tratamientos a varios cientos de grados durante tiempos que pueden ser de varias horas. Un método térmico distinto, y más reciente, para el crecimiento de nanoestructuras de óxidos es el basado en el calentamiento Joule y oxidación del metal, producido por una intensa corriente eléctrica que circula por un hilo metálico. Este tratamiento puede dar lugar al crecimiento sobre la superficie del hilo, de nanohilos, nanoplacas y otras nanoestructuras de óxidos metálicos en tiempos tan breves como unos cuantos segundos o minutos. En esta presentación se muestran resultados del crecimiento de nanohilos y otras nanoestructuras de óxidos, principalmente de ZnO, obtenidos mediante calentamiento Joule en aire y también se demuestra la posibilidad de sintetizar nanoestructuras dopadas. Este crecimiento rápido de nanoestructuras de óxidos implica un proceso de difusión de iones hacia la superficie del hilo al que puede contribuir el gradiente térmico a lo largo del diámetro, así como el mecanismo de electromigración asistida térmicamente. Este último mecanismo es especialmente importante cuando el calentamiento Joule tiene lugar mediante densidades de corriente muy elevadas lo que contribuye a que el tiempo de crecimiento sea corto.

Palabras clave: *Óxidos metálicos, Nanoestructuras, ZnO, Calentamiento Joule.*

DEVELOPING INNOVATIVE NEREA® TECHNOLOGY FOR THE INDUSTRIAL PRODUCTION OF NEW ZEOLITIC SUBSTRATES, FERTILIZERS AND PESTICIDES FOR SUSTAINABLE AGRICULTURE BASED ON NATURAL ZEOLITE ENGINEERING

Gerardo Rodríguez-Fuentes^{1,2}, Inocente Rodríguez-Iznaga^{1,2}, Lorenzo A. Rivero González^{1,2}, Ernesto L. Rivero Robaina^{1,2}, Julio Cesar Molina-Amat^{1,2}, Armando Caisés Ávalos^{1,2,3}, E. Yamilé de la Nuez-Pantoja^{1,2}, Beatriz Concepción-Rosabal^{1,2}, Carlos A. Lariot-Sánchez^{1,2}

¹Laboratorio de Ingeniería de Zeolitas Naturales (NatZEng®), Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ²Fundación Universitaria de Innovación y Desarrollo, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³UEB Geominera Holguín, Holguín, Cuba.

Email: gerardo@imre.uh.cu, geradorodriguezfuentes2@gmail.com

ABSTRACT:

In the last five years, NatZEng® specialists have intensified innovation on NEREA® technology supported by fundamental studies, creating new technological procedures and micronized products for agriculture with high added value patented (CU20210017A7 / CA3138031 A1), generating new zeolitic sulphur products obtained by mechanochemistry for plant treatment (patent application CU 2024-0005). These contributions to a sustainable agriculture have been validated, registered, scale up to industrial production of the NEREA® products by technology transference and licence contracts with Cuban enterprises. NEREA® products advertising campaign allowed their sold in Cuba. Cuban government organizes and leads the national production of NEREA® products since 2023. The work discusses these results, which has been recognized with awards in Cuba, Canada and also by the scientific community:

1. Gold Medal Product Quality Award. XVI Trade Fair of Holguín EXPO 2023, Cuba.
2. Distinguish Speakers Awards for plenary conference “*NEREA Technology: A new paradigm for Agriculture*”. Brazil-India-Cuba-China-United Kingdom (BIC²UK) Conference on Nanomaterials & Machine Learning, 2023.
3. Province of Ontario Honours IZC as Recipient of NEREA Fertilizer Accelerating Solutions and Technological Challenge, 2023.
4. Government of Canada-Funded i.d.e.a. FundTM awarded NEREA green products and technology to reduce climate change, 2023.
5. CITMA 2022 Provincial Award for Technological Innovation, Havana, Cuba “*NEREA: Innovative products and technologies for sustainable agriculture*”.
6. CITMA 2023 Special Award for Highest Economic Impact, and National Award for Technological Innovation, Cuba: “*NEREA: Innovative products and technologies for Cuban agriculture*” GOC-2024-569-O97.
7. Rector of University of Havana Awards, 2024. for Technological Innovation of Highest Economic Impact, and Highest Impact in the Food Production.

Keywords: NEREA® technology, Zeolitic material, Sustainable agriculture, Innovation.

PEROVSKITE OXIDES FOR PHOTOCHEMISTRY AND ELECTROCHEMISTRY

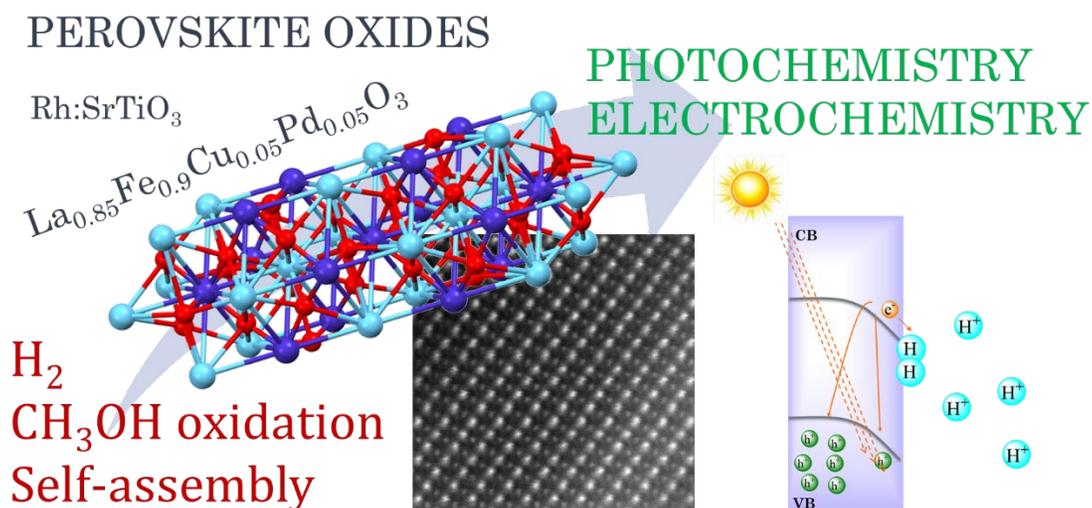
Manuel Antuch

Université de Lille, CNRS, Centrale Lille, Université d'Artois, UMR 8181—Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS), 59000 Lille, France.

E-mail: manuel.antuch@centralelille.fr

ABSTRACT:

Perovskite oxides are a class of materials defined by their unique crystal structure. Such family of compounds follows a general formula ABO_3 , where A is a rather large cation (like Sr or La) while B is a smaller transition metal cation, such as those of the first row of the periodic table. Nowadays, perovskite oxides play a critical role in advancing technology and scientific research due to their remarkable versatility and tunable properties. In particular, the main thread of this presentation is associated to perovskite oxides, aiming at providing a broad overview on a general preparation method of multiple perovskite oxides, allowing to highlight specific examples in the domains of electrocatalysis, photoelectrocatalysis and photochemistry. Typical examples to be covered are (i) the use of Rh:SrTiO₃ for the visible-light-driven production of hydrogen, (ii) the activity of La_{0.85}Fe_{0.9}Cu_{0.05}Pd_{0.05}O₃ for methanol electrooxidation and (iii) the self-assembly of La_{0.85}Mn_{0.9}Cu_{0.1}O₃ within complex polymeric networks, thus permitting to emulate certain higher-order behaviors observed in living systems, taking advantage of the photocatalytic activity of the perovskite. In conclusion, this work will convey a general vision on the emerging field associated to perovskite oxides, and how they are having a huge impact in the contemporaneous research tied to perovskite oxides, highlighting the significant influence such materials exert on contemporary research.



Keywords: Perovskite oxide, Photocatalysis, Electrocatalysis, Supramolecular self-assembly.

Comisión: Nanociencia y ciencias de materiales

Conferencias invitadas

PHYSICS AND CHEMISTRY ON THE NANOSCALE

Karina Morgenstern

Ruhr-Universität Bochum (RUB), Bochum, Germany.

E-mail: karina.morgenstern@ruhr-uni-bochum.de

ABSTRACT:

In the novel “The Wrench” from 1978, a chemist explains how he and his colleagues dream of building molecules, how they fantasize about tweezers with which they pick up individual parts of a molecule, hold them, and place them exactly where they are needed in a molecule. If such tweezers existed, we would be able to produce wonderful things such as only God was able to produce until now, the chemist ends his description. With the invention of the scanning tunneling microscope (STM) in the 1980s, such 'tweezers', which allow individual atoms and molecules to be observed and changed, were actually realized. Such physical and chemical systems are the subject of current basic research, on the one hand, and, on the other hand, they form the basis for future technologies in information technology. We employ this technique in order to understand the properties of nanostructures and chemistry on the nanoscale. Here, I will present the fascination of experimenting with individual atoms and molecules on three examples. First, the formation of nano-snowflakes is monitored from single water molecules to fractal islands. Then, the advantage of a laser-induced over a thermally induced on-surface reaction is demonstrated. Finally, an individual molecule is manipulated that might serve as a molecular switch in future nano-electronics.

Keywords: *Nanostructures, Scanning Tunneling Microscope (STM), Molecular Manipulation, Fractal islands, Nano-electronics, Solvation, Quantum Confinement.*

INNOVACIONES DEL CENTRO DE BIOMATERIALES EN EL CAMPO DE LOS PRODUCTOS DE USO ESTOMATOLÓGICO / BIOMATERIALS CENTER INNOVATIONS IN THE FIELD OF DENTAL PRODUCTS

Yaymarilis Veranes Pantoja¹, Oridayma Tarano Artigas¹, Selena Diaz Rodriguez¹, Rosa Mayelin Guerra Breña¹, Rubén Álvarez Brito²

¹ Centro de Biomateriales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: yayma.biomat@gmail.com, yayma@biomat.uh.cu

RESUMEN:

En el Centro de Biomateriales fueron desarrollados algunos productos de uso estomatológico como: RETENDEN®, esferas retentivas para fabricar puentes bucales, ALGIDENT, para impresiones dentales, CUBRIDEM®, sellante dental de fosas y fisuras para prevenir la caries dental y OBTUDENT®, obturante dental, los que no se llegaron al mercado debido a la falta de financiamiento para el completamiento de los estudios, producción y comercialización de los mismos. Otros como el TISUACRYL®, adhesivo tisular, APAFILL-G® y BIOGRAFT-G®, fosfatos de calcio para regeneración ósea, lograron ser registrados y comercializados. En la estomatología restaurativa se emplean un sinnúmero de materiales, siendo la amalgama el material que más ha sobrevivido en el tiempo, por sus bondades curativas y su facilidad de uso. Si bien las amalgamas han demostrado su eficacia clínica, preocupaciones ambientales y la búsqueda de una mejor estética en las restauraciones han limitado y prohibido en algunos países su uso, lo ha potenciado el desarrollo de otros materiales. El objetivo del trabajo es mostrar los resultados más recientes en el desarrollo de composites dentales en el Centro de Biomateriales, y como persisten las limitaciones para pasar de la investigación a la producción. Se estudiaron diferentes composiciones de los obturantes dentales, donde se evaluaron diferentes tipos y tamaños de rellenos, matrices poliméricas y sistemas de iniciación, se obtuvieron formulaciones que cumplen con los requerimientos de absorción y solubilidad en agua, profundidad de curado, grado de conversión y propiedades mecánicas, según las normativas vigentes, con las que se pudieran comenzar los ensayos preclínicos correspondientes.

Palabras clave: Composite dental, Grado de conversión, Biomateriales dentales.

Presentaciones orales

MAESTRÍA EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE LOS MATERIALES: UNA OPORTUNIDAD PARA LA FORMACIÓN DE POSGRADO EN MATERIALES

Olimpia Arias de Fuentes, Yodalgis Mosqueda Laffita, Edwin Pedrero González

Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: oarias@imre.uh.cu, olimpia.arias@gmail.com

RESUMEN:

Los materiales han jugado un papel primordial desde los inicios de la existencia del hombre. Así, los diferentes períodos de desarrollo de la humanidad han sido denominados acorde al material cuyo empleo predominaba en ellos. Si bien el estudio de los materiales es de gran importancia, resulta más trascendente la preparación de profesionales competentes en esta disciplina. La creación de un Programa de Maestría en Ciencia y Tecnología de los Materiales se justifica por el nivel mundial logrado en el desarrollo de nuevos materiales, el alto grado alcanzado en la sustitución de los materiales tradicionales y el carácter multidisciplinario de la Ciencia y Tecnología de Materiales. A ello se suman las nuevas posibilidades científicas y tecnológicas de diseño y fabricación de materiales que brinda el salto de la escala micrométrica a la nanométrica. El programa se estableció por primera vez en el 2000, perfeccionándose en cada edición hasta lograr, desde 2010, la categoría de Excelencia, condición que mantiene actualmente. Entre sus principales objetivos se encuentra la formación de profesionales de alto nivel, mediante la realización de investigaciones y el desarrollo de aplicaciones en el campo de la Ciencia de los Materiales. El programa incluye la necesaria formación teórica con diversos cursos, así como la realización de investigaciones dirigidas al campo de los materiales y su aplicación en la biomedicina, la nanotecnología, el medio ambiente, la energía, la construcción y la industria médico-farmacéutica, entre otras, por lo que ofrece una muy buena oportunidad para la formación de posgrado en este campo.

Palabras clave: Ciencia de materiales, Maestría, Formación de profesionales.

THE STRUCTURE-GIVING ROLE OF Rb⁺ IONS FOR WATER–ICE NANOISLANDS SUPPORTED ON Cu(111)

Javier A. Martínez Pons¹, Inga Langguth², David Olivenza León², Karina Morgenstern²

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Lehrstuhl für Physikalische Chemie I, Fakultät für Chemie und Biochemie, Ruhr-Universität Bochum (RUB), Bochum, NRW, Alemania.

E-mail: javmar@imre.uh.cu

ABSTRACT:

We characterize the effect of rubidium ions on water–ice nanoislands in terms of area, fractal dimension, and apparent height by low-temperature scanning tunneling microscopy. Water nanoislands on the pristine Cu(111) surface are compared to those at similar coverage on a Rb⁺ pre-covered Cu(111) surface to reveal the structure-giving effect of Rb⁺. The presence of Rb⁺ induces changes in the island shape, and hence, the water network, without affecting the nanoisland volume. The broad area distribution shifts to larger values while the height decreases from three bilayers to one or two bilayers. The nanoislands on the Rb⁺ pre-covered surface are also more compact, reflected in a shift in the fractal dimension distribution. We relate the changes to a weakening of the hydrogen-bond network by Rb⁺.

Keywords: *Solvation, Scanning tunneling microscopy, Rubidium.*

HYBRID MATERIALS BASED A NATURAL RESOURCE FOR SKIN CARE: BENTONITE/VITAMIN C AND BENTONITE/METFORMIN

**Dayaris Hernández Oliva¹, Yisleidys Acosta Antelo¹, Irela Pérez Sánchez², Clarence Charnay³,
César Antonio Viseras Iborra^{4,5}, Aramis Rivera Denis^{1*}**

¹ Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba. ² Institute of Pharmacy and Food (IFAL), University of Havana, Havana, Cuba. ³ Institut Charles Gerhardt de Montpellier, Université de Montpellier, Montpellier, France. ⁴ Faculty of Pharmacy, University of Granada, Granada, Spain. ⁵ Andalusian Institute of Earth Sciences, CSIC-University of Granada, Granada, Spain.

E-mail: dayaris@imre.uh.cu

ABSTRACT:

Clays are highly effective in cosmetology and dermatology. Bentonite (Bent) laminar clay, in particular, is widely used for their adsorbent properties, effectively reducing and controlling oil on the skin and scalp. They also offer protection against ultraviolet radiation. The development of hybrid materials based on a natural Cuban Bent, along with drugs as the L-ascorbic acid (LAA) and metformin hydrochloride (MET), offers a promising approach for creating new active ingredients in skin care formulations. Bent/LAA and Bent/MET hybrids obtained were characterized using X-ray diffraction (XRD), infrared (IR) spectroscopy, thermogravimetric analysis (TG) and zeta potential measurements. The presence of both drugs (LAA and MET) in the clay was confirmed, along with the photoprotective effect of Bent on the LAA molecule. Structural characterization suggests that MET may be adsorbed on the Bent surface and/or intercalated into the interlayer space, oriented according to its thickness. Hydrogen bonds and van der Waals forces are likely the primary drivers of clay/MET interactions. On the other hand, LAA incorporation primarily occurs within the interlayer space via electrostatic interactions. Moreover, the antioxidant capacity of the drug was preserve in the Bent/LAA nanohybrid material.

Keywords: *Clay, Bentonite, L-ascorbic acid, Metformin, Hybrid materials.*

NATURAL CLAY/POLYMER FILMS BY THE CASTING METHOD

Clariselys Leal Reyes^{1,2}, Dayaris Hernández Oliva¹, Ernesto Altshuler Álvarez², Aramis Rivera Denis¹

¹ Zeolites Engineering Laboratory, Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba. ² Chemistry Faculty, University of Havana, Havana, Cuba. ³ Group of Complex Systems and Statistical Physics, Physics Faculty, University of Havana, Havana, Cuba.

E-mail: clariselysleal@gmail.com

ABSTRACT:

Cuban natural bentonite (Bent) clay's distinctive properties -including its exfoliation into nanolayers in aqueous dispersions, high chemical stability, cation exchange capacity and swelling capacity- make it a promising reinforcing agent for polymer-based food packaging. In this work the incorporation of Bent into various biodegradable polymer matrices is evaluated in order to prepare hybrid nanocomposites with enhanced properties for food packaging. The casting method was used to prepare these nanocomposites by dispersing Bent into carboxymethylcellulose (CMC), hydroxypropylmethylcellulose (HPMC), polyvinyl alcohol (PVA), polyvinylpyrrolidone (PVP), and their binary blends (PVA/CMC and PVA/PVP). The resulting films were characterized using scanning electron microscopy (SEM), ultraviolet-visible spectroscopy (UV-Vis), X-ray diffraction (XRD), and Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR). Evaluation of physical properties, such as thickness, opacity, and water resistance, revealed significant improvements with the addition of Bent. SEM images showed a homogeneous dispersion of the clay within the polymer matrices. Ultraviolet-visible spectroscopy (UV-Vis) confirmed increased opacity, particularly in Bent/HPMC films, suggesting their suitability for packaging light-sensitive foods. Bent/HPMC and Bent/PVA/CMC films exhibited notable water stability, remaining intact for up to 20 days in water immersion, while Bent/PVA/PVP films dissolved after 24 hours. Bent/CMC films required calcium chloride pre-treatment to enhance water resistance. The results highlight the potential of natural bentonite-based nanocomposites for developing sustainable and high-performance food packaging solutions.

Keywords: *Bentonite, Films, Biodegradable polymers, Nanocomposites, Food packaging.*

NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS CON POTENCIALES APLICACIONES EN LA REMOCIÓN DE IBUPROFENO

Crislaine Suárez Llerena¹, César Escalante Bermúdez¹, Marcos Muñoz Arias^{1,2}, Sergio Díaz-Castañón³, Maite Insausti², Izaskun Gil de Muro², Alicia Díaz García¹

¹ Laboratorio de Bioinorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, Cuba. ² Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad del País Vasco UPV/EHU, España. ³ Advanced Materials Division, IPICYT, Camino a la Presa Sn José 2055, 78216, San Luis Potosí, México.

E-mail: crislainesuarez@gmail.com, adg@fq.uh.cu

RESUMEN:

Los fármacos antiinflamatorios no esteroideos son de fácil acceso y de amplio consumo. Los compuestos activos de estos medicamentos son excretados al medio ambiente por medio de la orina y las heces, por lo que constituyen una fuente importante de contaminantes emergentes. El ibuprofeno puede encontrarse tanto en cuerpos de agua como en sólidos, causando daños en los ecosistemas. Una de las propuestas actuales a la descontaminación de medios acuosos es el empleo de nanopartículas magnéticas, siendo una de ellas, los óxidos de hierro. Se han empleado diferentes recubrimientos de estas nanopartículas, entre ellos la β -ciclodextrina, un oligosacárido cíclico que presenta una superficie hidrofílica y posee una cavidad interna hidrofóbica, ideal para albergar en ella moléculas poco solubles como el ibuprofeno. Dado que el ibuprofeno forma complejos de inclusión con la β -ciclodextrina, se estudió la capacidad de adsorción del ibuprofeno en las nanopartículas de óxido de hierro recubiertas con β -ciclodextrina. Las mismas se obtuvieron por el método de coprecipitación in situ. Las IONPs@ β -CD fueron caracterizadas mediante FT-IR, TGA, TEM, DLS y VSM, presentando una morfología cuasi-esférica de diámetro de 15 ± 3 nm. En la curva de sedimentación a 400 nm se observa que sedimenta después de 2.5 horas alrededor del 85 % de las nanopartículas, lo que sugiere que el sistema presenta baja estabilidad en agua. Se estudió la cinética de adsorción e isoterma del ibuprofeno en las nanopartículas sintetizadas, siendo su capacidad de adsorción de 80 ± 3 mg/g a los 60 min.

Palabras clave: *Nanopartículas de óxidos de hierro, Coprecipitación, Capacidad de adsorción, Cinética e isoterma de adsorción, β -CD.*

DEPOSICIÓN BIOMIMÉTICA ACELERADA DE HIDROXIAPATITAS DOPADAS CON CINC SOBRE POLIETERETERCETONA (PEEK)

Yazmín Márquez Cruz¹, Lisachy Toledo Rodríguez¹, Nancy Bada Rivero², Nicolás Sirgado Pérez³, Jesús E. González Ruíz², Loreley Morejón Alonso¹

¹ Departamento de Química General e Inorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Biomateriales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: marquez.yazmin0307@gmail.com

RESUMEN:

La polietereetercetona (PEEK) es un polímero termoplástico semicristalino utilizado como alternativa a los implantes metálicos en aplicaciones biomédicas no sometidas a altas sollicitaciones mecánicas debido a su excelente biocompatibilidad, alta resistencia mecánica y buena resistencia a la fatiga y la abrasión. Sin embargo, su hidrofobicidad e inercia química dificultan la interacción celular dificultando el proceso de osteointegración que junto a las infecciones postoperatorias por formación de biofilmes, producen la falla del implante a largo plazo. El siguiente trabajo propone la modificación superficial de PEEK destinado a la fabricación de andamios para ingeniería de tejidos o implantes óseos mediante manufactura aditiva. Dichas modificaciones proponen el uso de diferentes agentes químicos y posterior deposición de recubrimientos bioactivos de hidroxiapatita (HA) y HA dopada con Zn, empleando disoluciones sobresaturadas en calcio (SCS) como alternativa al método biomimético tradicional. Las caracterizaciones físico-químicas y morfológicas fueron realizadas mediante Difracción de Rayos X (DRX) y Microscopía Electrónica de Barrido (MEB) respectivamente utilizando el software Image J® para el procesamiento de imágenes. Los resultados mostraron que el pretratamiento del PEEK mediante la sulfonación y posterior ataque con solución Piraña (60s) produce una superficie rugosa con alta porosidad y tamaños de poro aproximados (14 μm) que permiten la posterior adhesión de la capa de HA, la cual se obtiene mediante doble inmersión en SCS por un período total de 8h. El procedimiento propuesto permite obtener una capa homogénea de HA, que varía en cristalinidad y tamaño de partícula con la introducción de los iones Zn^{2+} .

Palabras clave: PEEK, Hidroxiapatita, Propiedades antimicrobianas, Disoluciones sobresaturadas en calcio.

DEPOSICIÓN BIOMIMÉTICA ACELERADA DE HIDROXIAPATITAS E HIDROXIAPATITAS DOPADAS CON ESTRONCIO SOBRE TITANIO

**Lianét de la Caridad García¹, Nancy Bada², Nicolás Sirgado³, Jesús E. González², Loreley
Morejón-Alonso¹**

¹ Departamento de Química General e Inorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Biomateriales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: lianetgarciahdez@gmail.com

RESUMEN:

El titanio (Ti) es considerado uno de los materiales de sustitución ósea por excelencia, debido a su excelente biocompatibilidad, resistencia a la corrosión y bajo módulo elástico (en comparación con otros metales). Sin embargo, posee una baja tasa de osteointegración por lo cual suele someterse a diferentes tratamientos superficiales que aumenten la tasa de éxito de los implantes. El presente trabajo propone la obtención y caracterización de recubrimientos de hidroxiapatita (HA) e hidroxiapatita dopada con estroncio (Sr-HA) sobre Ti previamente activado mediante implantación de iones calcio empleando soluciones sobresaturadas en calcio (SCS) como alternativa al método biomimético tradicional. Una vez obtenidos los recubrimientos, estos serán tratados 1h a 800°C con el objetivo de aumentar la adherencia de los mismos al sustrato. Las muestras obtenidas fueron caracterizadas mediante microscopía electrónica de barrido, difracción de rayos-X y espectrometría por dispersión de rayos-X. Los resultados mostraron que el uso de SCS, combinado con la activación mediante pre-calcificación, permite obtener recubrimientos de HA e Sr-HA en tiempos inferiores a los reportados en la literatura. Inicialmente se obtuvo un recubrimiento bifásico compuesto por HA y dihidrógeno fosfato de calcio debido al no control del pH durante la síntesis; sin embargo, la composición final luego del tratamiento térmico mostró solamente la presencia de HA. Debe apuntarse que, los recubrimientos obtenidos no fueron homogéneos y presentaron un espesor de capa no adecuado, por lo que se realizó una segunda modificación a la metodología propuesta, obteniendo recubrimientos más homogéneos y con características morfológicas adecuadas para la aplicación deseada.

Palabras clave: *Titanio, Hidroxiapatita, Precalcificación, Deposición biomimética, Soluciones supersaturadas en calcio.*

POLÍMERO DE IMPRESIÓN MOLECULAR TIPO ACRÍLICO EN EL DESARROLLO DE ELECTRODOS SENSIBLES A IONES GLUTAMATO

Yenisleidy Valdés Arencibia¹, Ana Rosa Lazo Fraga¹, Markel Denet Luaces Alberto¹, Christian Domínguez Castillo^{1,2}, Thalía Raful González^{1,2}, Regina de la Haya Torres¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: yeni.k.arencibia@gmail.com

RESUMEN:

Los Electroodos Selectivos a Iones constituyen una herramienta electroquímica de gran versatilidad para la determinación de diversos analitos, ya que su selectividad y/o sensibilidad pueden ser modificadas según el ionóforo o receptor presente en la membrana sensora. Los Polímeros de Impresión Molecular han sido utilizados como ionóforos en la determinación de diferentes analitos. En este trabajo se construyeron electrodos de estado sólido tipo convencional sensibles a iones glutamato, con el empleo de un Polímero de Impresión Molecular tipo acrílico, con grupos funcionales amidino, como ionóforo. Se estudiaron seis disolventes mediadores o plastificantes comerciales diferentes: tributilfosfato, bis-2-etilhexilsebacato, bis-(2-etilhexil)ftalato, dibutiloftalato, 3-nitro-ortoxileno y tris-(2-etilhexil)fosfato. La mejor respuesta se obtuvo para el electrodo que emplea tributilfosfato como disolvente mediador, mostrando una sensibilidad de -50 mVdec^{-1} a los cambios de concentración del ion glutamato, y un límite práctico de detección de $10^{-6} \text{ molL}^{-1}$. La caracterización analítica del electrodo mostró un tiempo de respuesta de 15 segundos, una vida útil de aproximadamente 30 días, y un intervalo de pH de trabajo entre 4 y 5. Constituyeron interferentes: el ácido aspártico, el ácido N-Fmoc-L-glutámico, el ácido ascórbico y el ácido acético. Los resultados destacan el potencial de este Polímero de Impresión Molecular para el desarrollo de electrodos sensibles al ion glutamato.

Palabras clave: *Electrodo selectivo a iones, Polímero de impresión molecular, glutamato y tributilfosfato.*

COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES, EVALUACIÓN SENSORIAL Y TIPO DE RON

Daimy Lázara López Hernández¹, Juan Jesús Piña Leyte-Vidal¹, Danay González García², Mario Simeón Pomares Alfonso²

¹ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: daimylopez60@gmail.com

RESUMEN:

El ron es un producto de exportación de gran importancia para la economía cubana. Preservar y aumentar su calidad es de interés nacional. La tipicidad del ron está estrechamente relacionada con su composición de compuestos orgánicos volátiles (COVs). Sin embargo, existen pocos reportes sobre este aspecto en rones cubanos. Este estudio tuvo como objetivo explorar la relación entre: a) las concentraciones de diez COVs, b) seis parámetros organolépticos y c) el tipo de ron. Se seleccionaron 142 muestras de 19 tipos de ron producidos en la misma fábrica en 2023 y se analizaron: a) por Cromatografía de Gases al menos cuatro veces en dos meses diferentes según la Norma Cubana NC 508:2011 y b) se evaluaron seis parámetros organolépticos en panel de expertos. Los programas Origin Lab 2022 y JMP Pro 17 se emplearon para el análisis estadístico y quimiométrico. El análisis de componentes principales (ACP) explicó el 92 % de la variabilidad total con solo dos de las diez variables originales, clasificando los rones en cuatro grupos según su añejamiento. Además, se determinó el grado de influencia de cada COV sobre el añejamiento y se exploró la relación entre la evaluación sensorial, los COVs y el añejamiento. El análisis discriminante lineal (ADL) corroboró la clasificación, confirmando los tipos de ron en cada grupo. El análisis mediante bosques aleatorios (BA) confirmó el 93% de la clasificación dada por ACP y ADL, evaluando la influencia de cada COV sobre el añejamiento. Se estudiaron vías para la optimización del modelo BA.

Palabras clave: *Ron cubano, Compuestos orgánicos volátiles, Análisis multivariado, Calidad, Añejamiento*

OBTAINING ZnO NANOPARTICLES BY AQUEOUS SYNTHESIS: A COMPARISON OF THREE METHODS

Mayra González-Hurtado¹, G. George Ponce de León¹, Abdel Alimonta¹, Ibis Durán-Sosa²,
Augusto Iribarren¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ²
Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mails: augusto.iribarren@gmail.com, augusto@imre.uh.cu

ABSTRACT:

ZnO nanoparticles were obtained by three aqueous synthesis methods. As reference a named standard method with mechanical stirring was used. In a second method polyvinyl alcohol (PVA) was added to the precursor dissolution. The third method was as that standard but using strong stirring. As results it was found that the method with PVA gave the smallest grain size and reduces the strain. That was associated to the surfactant effect of PVA during the grain formation. The strong-stirring method gave the lowest strain, but the biggest grain sizes (see Fig.). That finding was associated to an Ostwald ripening effect and the energy that the strong stirring transmits during the grain formation. This work allows selecting and studying various synthesis methods to obtain and modify ZnO nanoparticles according to the characteristics required for some of its multiple applications.

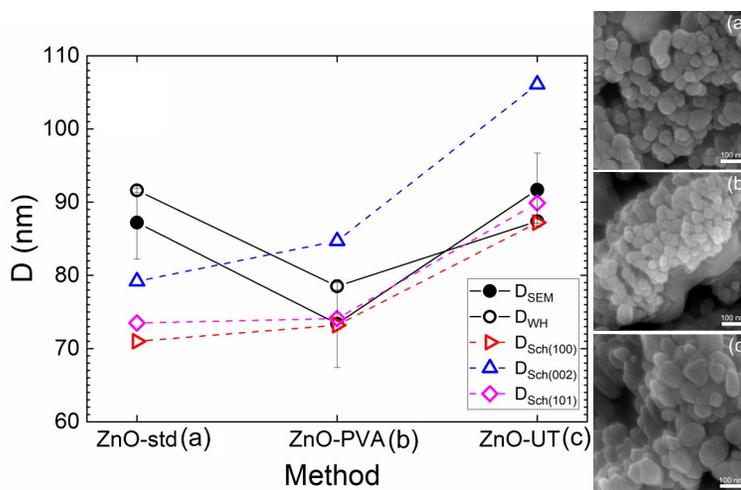


Figure: Grain and crystallite size and SEM images of the ZnO nanoparticles obtained with each synthesis method.

Keywords: ZnO, Aqueous synthesis, Co-precipitation, Nanoparticles, Crystallite size, Strain.

SÍNTESIS DEL NANO-TiO₂ ELECTROLÍTICO. NUESTRAS EXPERIENCIAS COMO BACTERICIDA

Ernesto Peláez Abellán¹, Mario Cruz Arias², José Raúl Correa Reina¹, Fresnel Forcade Zamora³

¹ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Facultad de Biología, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: ernestoamadopelaezabellan@gmail.com, pelaez@fq.uh.cu

RESUMEN:

El TiO₂ es uno de los semiconductores más utilizados industrialmente en pinturas, cosméticos, catalizadores, sensores ópticos, etc. Como catalizador presenta limitaciones debido a que sólo absorbe en el UV y pierde eficiencia por la recombinación de los pares electrón-hueco. Una forma de salvarlas es incorporándole metales de transición como la Ag. El objetivo de este trabajo es demostrar que materiales sintetizados en la Facultad de Química, UH, como el nano-polvo de TiO₂ y el nano-composite TiO₂-Ag son capaces de inhibir el crecimiento bacteriano. El nano-polvo de TiO₂ se sintetizó utilizando el método electrolítico según *CU-24436*, 2019. y los composites TiO₂-Ag, por reacción fotoquímica del nano-polvo TiO₂ con AgNO₃ por vía húmeda. La inhibición bacteriana se realizó, en placa Petri con Agar nutriente y en caldo nutritivo. Los resultados demuestran que el TiO₂ sintetizado tiene un tamaño menor que 100 nm, y presenta una gran cantidad de OH superficiales, aumentando su actividad. El composite TiO₂-Ag presenta mayor tamaño y al aumentar el tiempo de síntesis, tiene mayor cantidad de plata. Además, el tamaño de partícula aumenta considerablemente con el tiempo, pero nunca mayor a 200 nm. También, los composites presentan mayor efecto bactericida que el TiO₂, el cual es mayor con el aumento del contenido de plata. El efecto inhibitor es mayor para las bacterias Gram positivas (*Bacillus subtilis* y *Micrococcus luteus*), que para las Gram negativas (*Escherichia coli* y *Pseudomonas sp*). Estos resultados confirman que en nuestro laboratorio es posible la producción de estos materiales como agentes bactericidas para el tratamiento de aguas.

Palabras clave: Nano, TiO₂, Bactericida, Tratamiento de agua.

BIMETALLIC Cu^{2+} - Zn^{2+} SYSTEM ON CLINOPTILOLITE: ION-EXCHANGE SELECTIVITY AND CATALYTIC ACTIVITY IN *NO*-REDUCTION.

Inocente Rodríguez-Iznaga¹, Vitalii Petranovskii², Felipe F. Castillon Barrasa², Fernando Chávez Rivas³, Rodolfo F. Espinosa⁴

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Departamento de Nanocatálisis, Centro de Nanociencias y Nanotecnología (CNYN), Universidad Nacional Autónoma de México, Ensenada, B.C. México. ³ Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional (IPN) D.F., México. ⁴ Departamento de Física, Universidad Tecnológica de la Habana “José Antonio Echevarría” (CUJAE), La Habana, Cuba.

E-mail: inocente@imre.uh.cu

ABSTRACT:

Zeolites modified with cations and nanospecies of zinc and copper are of interest for the development of new materials with important properties such as biocide, catalytic and others. Their application fields are broad, including the catalytic reduction of noxious-gases like NO_x emitted from mobile and stationary stations with hurtful incidences due to acid-rain and smog formation, which affect the environment. Commonly, modification methods include ion exchange as one of their steps. Furthermore, materials are usually prepared with a single type of metal. However, the use of multimetallic systems can lead to improvements in both the properties of the resulting materials and the methods used for its preparation. This work is aimed to study the ion-exchange of bimetallic Cu^{2+} - Zn^{2+} system in natural clinoptilolite (CLI). In addition, the catalytic potential of mono- and bi-metallic materials in *NO*-reduction with $\text{CO}/\text{C}_3\text{H}_6$ was also evaluated. The bimetallic materials were prepared by successive ion-exchanges; its characterization was carried out by X-ray diffraction, UV-Vis Diffuse Reflectance Spectroscopy and other techniques. The obtained results showed a higher selectivity of CLI toward Cu^{2+} cations with respect to Zn^{2+} . The species with the highest catalytic activity correspond to copper. The presence of zinc enhanced this activity in the bimetallic systems compared to the copper monometallic system. It was associated with an effect of zinc on the copper active species to promote electrons transfer for *NO* reduction.

Keywords: *Clinoptilolite zeolite, Ion-exchange, Copper-Zinc, NO-reduction, Bimetal system.*

MODIFYING OPTICAL PROPERTIES OF AZO THIN FILMS FABRICATED BY RF-SPUTTERING WITH TWIST SUBSTRATE-ASSISTED GLAD

Z. Garduño¹, L.G. Daza², A. Iribarren³, R. Castro-Rodríguez¹

¹ Department of Applied Physics, CINVESTAV-IPN, Unity Mérida. Yucatán, Mexico. ² Materials Science Laboratory, Faculty of Engineering, University of Yucatán, Mexico. ³ Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba.

E-mail: augusto.iribarren@gmail.com

ABSTRACT:

This study presents the use of Twist Substrate-Assisted Glancing Angle Deposition (TSA-GLAD) for the fabrication of nanocolumnar aluminum-doped zinc oxide (AZO) thin films on borosilicate glass substrates. The TSA-GLAD technique combined radio-frequency sputtering with controlled precession substrate rotations at several speeds and a twist frequency of 0.5 Hz over a 40-minute deposition period. A remarkable reduction in solar weighted reflectance (SWR) from 20 % in single-layer films to as low as 13 % in multilayer configurations, indicated superior anti-reflective capabilities. The films maintain over 80 % transparency in the visible spectrum. Additionally, the average porosity of the films was quantified between 12 and 14.5 % for samples with different rotational directions, which highlights the influence of substrate rotation on structural properties of the AZO thin films. The findings reveal the TSA-GLAD technique is capable of enhancing the optical properties of AZO thin films. Future challenges include refining morphology control, exploring different substrates, and assessing durability under varying environmental conditions for practical applications in solar cells and smart windows.

Keywords: *AZO thin films, Nanostructures, rf-sputtering, Morphological properties, Optical properties.*

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR NANOESTRUCTURADO Fe₃O₄@SiO₂@Cu₂O

Eduardo Raúl González¹, Rubén Parra¹, Reinier Lemos², Marcos Muñoz-Arias¹, Izaskun Gil de Muro³, Maite Insausti³, Alicia Díaz-García¹

¹ Laboratorio de Bioinorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, Cuba. ² Laboratorio de Síntesis Orgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, Cuba. ³ Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad del País Vasco UPV/EHU, España.

E-mail: eduraul2001@yahoo.es

RESUMEN:

Los materiales compuestos a base de óxidos metálicos nanoestructurados y particularmente los que contienen óxidos de cobre resultan atractivos en diferentes aplicaciones catalíticas dadas sus características electrónicas y superficiales, su factibilidad económica y su carácter ecológico. La accesibilidad de estados de oxidación del cobre, tanto en sistemas moleculares como en sólidos cristalinos, favorece diferentes tipos de interacciones metal-ligando útiles en catálisis homogénea y heterogénea mediada por especies radicálicas o iónicas. En este trabajo se prepararon nanopartículas de Cu₂O soportados en nanopartículas de óxidos de hierro modificadas con sílice mediante pasos sucesivos de precipitación y deposición. Los catalizadores obtenidos se caracterizaron mediante difracción de Rayos X, fluorescencia de Rayos X y espectroscopia infrarroja, y se confirmó la presencia de la fase de óxido de hierro correspondiente a magnetita/maghemita, de la modificación con sílice y de la deposición de una fase de Cu₂O. Mediante microscopía electrónica de transmisión se determinaron tamaños de partículas de valores medios entre 12-15 nm, asociados a morfologías pseudoesféricas. Al ser empleadas para catalizar la reacción de Hantzsch para la síntesis de 2,6-dimetil-3,5-dicarbetoxi-1,4-dihidropiridinas, se logró una disminución apreciable del tiempo de reacción y una mejora considerable del rendimiento. Además, el electrodo modificado con el material mostró buen comportamiento electrocatalítico para la electrooxidación de H₂O₂ con un mecanismo cinético controlado por la difusión o la adsorción según la velocidad de barrido de la medición voltamperométrica. Su potencialidad como sensor de H₂O₂ quedó demostrada por la dependencia lineal entre la respuesta rápida estable de corriente y la concentración del analito en un intervalo dinámico de 4 a 20 mmol L⁻¹ y valores de sensibilidad y límite de detección de 314.6 μA mmol⁻¹ L cm⁻² y 2.1 mmol L⁻¹ respectivamente.

Palabras clave: Nanoestructuras de óxidos metálicos, Síntesis de Hantzsch, Sensor de H₂O₂.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE ZINC Y ÓXIDO DE COBRE (II) CON POTENCIALES APLICACIONES EN LA AGRICULTURA

Juan Carlos Hernández Rodríguez¹, Marcos Muñoz-Arias^{1,2}, Izaskun Gil del Muro², Maite Insausti², Yamilet Coll³, Alicia Díaz García¹

¹ Laboratorio de Bioinorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, Cuba. ² Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad del País Vasco UPV/EHU, España.

³ Centro de Estudios de Productos Naturales, Facultad de Química, Universidad de La Habana, Cuba.

E-mail: jchr5102@gmail.com

RESUMEN:

Actualmente las formulaciones basadas en nanopartículas combinadas con principios activos de interés agrícola están captando mucha atención. Ventajas como baja cantidad de aplicación, estabilidad y bajo impacto ambiental de las nanopartículas las hacen favorables al desarrollo de formulaciones que potencien el control de plagas o estimulación de los cultivos. Entre otras, las nanopartículas de óxido de cobre(II) y las de óxido de zinc presentan actividad antifúngica y antibacterial demostrada. Este es un esfuerzo encaminado al desarrollo de potenciales productos para control de plagas de almacén que actúe sobre la calidad de las semillas. En ese sentido se sintetizaron nanopartículas de óxido de cobre(II) y óxido de zinc mediante métodos de precipitación, las nanopartículas fueron funcionalizadas con grupos anhídrido maleico mediante un recubrimiento post síntesis. Las nanopartículas se caracterizaron mediante difracción de rayos X, espectroscopia de infrarrojo, microscopía electrónica de transmisión, termogravimetría, y dispersión dinámica de luz. Las nanopartículas obtenidas presentaron patrones correspondientes a las fases wurzita y monoclinica para ZnO y CuO respectivamente. La morfología presentada por las ZnONPs fue de trapezoides con un diámetro aproximado de 38 nm, mientras que las CuONPs presentaron forma de láminas delgadas con grosor y tamaño variado. Se realiza análisis por Dispersión Dinámica de la Luz y potencial zeta para conocer el diámetro hidrodinámico y estabilidad en medio acuoso de las NPs funcionalizadas. Mediante una reacción de esterificación se inmovilizó la diosgenina en la superficie de las nanopartículas, corroborando la inmovilización mediante espectroscopia de infrarrojo.

Palabras clave: *Nanopartículas de óxido de zinc, Nanopartículas de óxido de cobre (II), Diosgenina, Esterificación.*

EL PAPEL DE LA CARGA DE LA ARCILLA EN LA MOVILIDAD DE LOS CATIONES DE COMPENSACIÓN: UNA APROXIMACIÓN DESDE LA DINÁMICA MOLECULAR

Carlos David Marrero Pérez¹, Anabel Lam¹, German Rojas Lorenzo²

¹Laboratorio de Ingeniería de Zeolitas, Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ²Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: krlodavid419@gmail.com

RESUMEN:

La carga de las arcillas desempeña un rol importante en la movilidad de los cationes de compensación y en los procesos de hinchamiento. En este trabajo hemos desarrollado un método para generar modelos de la arcilla Litio Fluorhectorita (Li-Fh) con carga igual a $-1,2e$ y una distribución de carga no homogénea. Esta carga se aproxima más al valor reportado experimentalmente. Utilizando simulaciones de dinámica molecular (DM) hemos estudiado la interacción de la Li-Fh con agua. Las simulaciones de DM mostraron que el coeficiente de difusión del Li^+ aumenta en dos órdenes de magnitud con la disminución de la carga de la arcilla. Los análisis de población y la coordinación del Li^+ indican una mayor interacción del catión con las moléculas de agua al disminuir la carga de la arcilla, lo que conduce a una deformación en el apilamiento de las láminas en el modelo 010. Estos resultados ponen de relieve la importante influencia de la carga de la arcilla en la dinámica de los cationes y el comportamiento estructural, proporcionando una visión de los mecanismos de delaminación e hinchamiento.

Palabras clave: *Dinámica Molecular, Difusión en sólidos, Modelación y simulación computacional.*

ESTUDIO MEDIANTE EL DFTB+ DE LA ESTABILIDAD Y PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE NANOCEBOLLAS DE CARBONO CON DEFECTOS PUNTUALES PRODUCTO DE LOS PROCESOS DE IRRADIACIÓN

Susana M. Montesino Castillo, Maykel Márquez Mijares, Daniel Codorniú Pujals

Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: susanamontesinocastillo@gmail.com

RESUMEN:

El interés por las nanocebollas comenzó con los trabajos de Ugarte en 1992 y 1993 donde se estudia la curvatura y el cerrado de redes de grafito, así como el incremento en la esfericidad en materiales de carbono cuando se irradiaban con haces de electrones. En 1995 Xu y Tanaka reportaron la transformación de carbono amorfo en nanocebollas gigantes por irradiación con haz de electrones. Por la contribución realizada con los trabajos anteriores es conocido actualmente que la irradiación con electrones conduce a la producción de defectos puntuales modificando las propiedades estructurales y electrónicas. En nuestro trabajo se estudió la variación en las propiedades electrónicas de nanoestructuras de carbono ante la producción de defectos puntuales. Se optimizaron las geometrías de los fullerenos C60, C240, C540 y las nanocebollas C60@C240, C240@C540, C60@C240@C540 utilizando el método de la Teoría del Funcional de Densidad con aproximación de Enlace Fuerte (DFTB). Igualmente fueron calculados los valores energéticos de formación para cada defecto producido. Se obtuvieron las densidades de estados por energía lo que permitió analizar su variación al producirse defectos en la estructura. Se obtuvo la diferencia total de la carga, comparándose los resultados para las geometrías con y sin defectos. Se obtuvieron el máximo nivel electrónico ocupado (HOMO) y el mínimo nivel desocupado (LUMO) para cada una de las estructuras. Finalmente se estudió la difusión electrónica utilizando el método de banda elástica guiada (NEB), “nudged elastic band”, para determinar el Camino de Mínima Energía (MEP).

Palabras clave: Nanocebollas, Defectos puntuales, Propiedades electrónicas.

ADSORCIÓN DE PLATINO(II) EN LA ZEOLITA CUBANA (SAN ANDRÉS) EN MODO DINÁMICO

Ana Laura Romero García¹, Laura Carmona Fernández², Regina de La Haye Torres², Odalys Collazo García², Mario S. Pomares Alfonso², Margarita E. Villanueva Tagle¹

¹ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: analaromero370@gmail.com

RESUMEN:

La extracción en fase sólida (EFS) constituye una alternativa viable y eficiente para el tratamiento de aguas contaminadas con residuos de citostáticos del Platino(II). Uno de los aspectos fundamentales a tener en cuenta para llevar a cabo la EFS es la selección del material adsorbente. Las zeolitas son conocidas por sus propiedades como intercambiadores iónicos y han sido poco empleadas en la sorción de compuestos del platino. El objetivo del presente trabajo es evaluar las potencialidades de la zeolita natural cubana del yacimiento de San Andrés en la remoción del Pt(II) en modo dinámico y su posible aplicación en el tratamiento de aguas residuales de citostáticos del platino. Los experimentos se llevaron a cabo con una disolución de Pt(II) de 10 mg L⁻¹ a pH 6. Se estudiaron los siguientes parámetros experimentales: dos tamaños de partícula entre 0.5-1 mm y 0.4-0.5 mm; altura del lecho 1.7, 2.8 y 4.5 cm, que se corresponden con masas de zeolita de 0.3, 0.5 y 0.8 g respectivamente; velocidad de muestreo: 0.5, 1, y 2 mL·min⁻¹; tipo de eluyente; velocidad de elución; y volumen de ruptura. En todos los ensayos fueron seleccionados los parámetros que se corresponden con los mejores porcentajes de retención, por ejemplo, fue seleccionado como tamaño de partícula óptimo 0.4-0.5 mm y caudal de 2 mL·min⁻¹. La cuantificación del Pt(II) en los ensayos se realizó mediante la determinación espectrofotométrica con OPDA por espectroscopia UV-Vis. Las características de la zeolita natural cubana del yacimiento de San Andrés como sorbente de compuestos de Pt(II) confirman su potencial utilización en la remediación de aguas contaminadas.

Palabras clave: $[PtCl_4]^{2-}$, Zeolita cubana (San Andrés), Extracción en fase sólida, EAM UV-Vis.

Carteles

ESTUDIO DE LA FLUORESCENCIA DE PUNTOS CUÁNTICOS DE TELURO DE CADMIO (QDs-CdTe) ESTABILIZADOS CON L-CISTEÍNA BAJO DIFERENTES CONDICIONES DE SÍNTESIS

José Cruz Pérez¹, Francisco J. Solís-Pomar¹, Claudio D. Gutiérrez-Lazos¹, Mitchel A. Ruiz-Robles¹, Abel Fundora Cruz², Eduardo G Pérez-Tijerina¹

¹ Universidad Autónoma de Nuevo León, Centro de Investigación en Ciencias Físico Matemáticas, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Ave. Universidad s/n, Ciudad Universitaria, 66451 San Nicolás de los Garzas, Nuevo León, Mexico. ² Instituto Superior de tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, Ave. Salvador Allende No. 1110, entre Ave. Rancho Boyeros e Infanta, Quinta de los Molinos, Plaza de la Revolución, La Habana, Cuba.

E-mail: abel.fundora@instec.uh.cu

RESUMEN:

En este trabajo se describe una ruta de síntesis one-pot de puntos cuánticos (QD) de telurio de cadmio (CdTe) con L-cisteína como agente estabilizante, usando calentamiento por microondas y a temperatura ambiente. Se investigaron los parámetros de concentración de L-cisteína, el pH, el efecto del tiempo de reacción y la aplicación de tratamiento térmico, para entender el mecanismo de crecimiento, la estabilidad temporal y las variaciones en las propiedades ópticas de los QDs-CdTe. Las muestras se caracterizaron por espectroscopia ultravioleta-visible, espectroscopia de fluorescencia, difracción de rayos X y microscopía electrónica de barrido. Los resultados muestran una clara dependencia del pH y la concentración de la L-cisteína en la luminiscencia de los puntos cuánticos.

Palabras clave: *Puntos cuánticos, Telurio de cadmio, Cisteína, Fluorescencia.*

OBTENCIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CdSe MEDIANTE LA SÍNTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS

Leira Liz Rodriguez Betancourt, Yarima Sánchez García, Adelmo Montalván Estrada, Emilio Acosta Medina, Brian Mondeja Rodríguez, Sheyla Bermúdez Pérez, Yoana Andina Hernández, Ahmed Valdés Martínez

Centro de Estudios Avanzados de Cuba, Ministerio de Ciencia, Tecnología y Medio Ambiente (CITMA), La Habana, Cuba.

E-mail: leiralrb@gmail.com, leira.rb@cea.cu

RESUMEN:

Los puntos cuánticos (QDs, por sus siglas en inglés Quantum Dots) se presentan como uno de los avances más prometedores en el campo de la nanotecnología. Estos nanocristales semiconductores exhiben una combinación de propiedades optoelectrónicas únicas y ajustables que los hacen aptos para su empleo en una amplia gama de aplicaciones. En el presente trabajo, se sintetizaron QDs de CdSe fluorescentes mediante el método de síntesis asistida por microondas, empleando ácido tioglicólico como precursor de grupos tiol y carboxilo. Este procedimiento resalta por su simplicidad experimental, siempre que se disponga del equipamiento adecuado. Los QDs obtenidos presentaron emisiones de color amarillo brillante bajo luz ultravioleta a 365 nm. Sus propiedades ópticas de absorción y luminiscencia se determinaron mediante espectroscopia de absorción ultravioleta-visible y espectrofluorimetría. Además, se caracterizaron mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier, observándose grupos funcionales como, OH⁻, C-N, C-O y C=O, dando una perspectiva de la composición en su superficie. Se realizaron estudios de interacción de los puntos cuánticos con la proteína albúmina de suero bovino (BSA) mediante dicroísmo circular y se evaluó su fluorescencia frente a diferentes líneas celulares y muestras de tejido de pulmón empleando un microscopio confocal de barrido láser. Por otra parte, se evaluó el carácter citotóxico de estas nanopartículas en la línea celular de adenocarcinoma de pulmón (A549) demostrando que los QDs no presentan efectos tóxicos asociados a su tratamiento en las dosis estudiadas (1 - 200 µg/mL). Los resultados obtenidos destacan el potencial de los QDs de CdSe para aplicaciones biomédicas.

Palabras clave: *Puntos cuánticos, Microondas, Nanopartículas, Fluorescencia, Aplicaciones biológicas.*

ESTUDIO DE PRUEBAS DE CONCEPTO PARA LA FUNCIONALIZACIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CdTe/ZnS EN APLICACIONES BIOLÓGICAS

Amalia Lozano Navarrete¹, Hermes Fundora Hernández², Hermidia Ricardo Pereira², Arleny Hernández García³, José Cruz Perez⁴, Claudio Gutierrez Lazo⁴, Francisco Solis Pomar⁴, Eduardo Pérez Tijerina⁴, Abel Fundora Cruz¹, José Hernández Gómez³

¹ Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Facultad de Ciencias Médicas Julio Trigo López, La Habana, Cuba. ³ Hospital Pediátrico Docente de Centro Habana, La Habana, Cuba. ⁴ Laboratorio de Nanociencia y Nanotecnología, Facultad de Físico-Matemática, Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey, México.

E-mail: amalitalozanonavarrete@gmail.com

RESUMEN:

En este trabajo se aborda el estudio del desarrollo y la evaluación de puntos cuánticos de CdTe/ZnS con el fin de investigar su potencial en aplicaciones biológicas. Los puntos cuánticos, son conocidos por sus propiedades ópticas únicas y su alta estabilidad fotoquímica, se han considerado como posibles herramientas innovadoras en bioimagenología, biodetección, entre otros. En la bioimagenología, pueden ser utilizados como agentes de contraste para mejorar la visualización de estructuras celulares y tejidos específicos. En la biodetección, pueden ser empleados como sensores biológicos para detectar la presencia de biomoléculas o patógenos con alta sensibilidad y especificidad. Además, los puntos cuánticos de CdTe/ZnS tienen el potencial de ser aplicados en terapias fotodinámicas, donde su capacidad de generar especies reactivas de oxígeno bajo la irradiación de luz puede ser aprovechada para destruir células cancerosas, entre otros muchos ejemplos. Comúnmente se sintetizan mediante un método de solución coloidal, se caracterizan por sus propiedades ópticas y estructurales, utilizando técnicas como la espectroscopía UV-Vis, la fotoluminiscencia y la microscopía electrónica de transmisión (TEM, de sus siglas en inglés Transmission Electron Microscopy). Además, se realizan ensayos de citotoxicidad para evaluar su biocompatibilidad. Los puntos cuánticos de CdTe/ZnS presentan una fuerte emisión de fotoluminiscencia y una excelente estabilidad en medios biológicos, según revisiones bibliográficas. Este estudio proporciona una base sólida para futuras investigaciones sobre el uso de puntos cuánticos de CdTe/ZnS en la bioimagenología y biodetección, destacando su potencial como herramientas avanzadas en la medicina y biología.

Palabras clave: *Puntos Cuánticos, Biocompatibilidad, Funcionalización, Fotoluminiscencia, Biodetección.*

EFECTOS DE LA INCORPORACIÓN DE CROMO EN EL ANCHO DE LA BANDA PROHIBIDA DE NANOESTRUCTURAS CRISTALINAS DE ZnO

Olimpia Arias de Fuentes¹, Augusto Iribarren Alfonso¹, Evgen Prokhorov², Martín A. Hernández Landaverde²

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (CINVESTAV), Unidad Querétaro, Querétaro, México.

E-mail: oarias@imre.uh.cu, olimpia.arias@gmail.com

RESUMEN:

El ZnO es un óxido metálico semiconductor del grupo II-VI, con una banda prohibida directa de 3.37 eV en su forma masiva, que posee numerosas propiedades tanto físicas como químicas que lo hacen importante para diversas aplicaciones. La energía de la banda prohibida tiene un gran valor para explicar y predecir las propiedades de los semiconductores, por ello resulta importante el estudio de su variación cuando dopamos con diferentes metales. El presente trabajo reporta la influencia de diferentes niveles de dopaje con Cr³⁺ en el valor de la energía de la banda prohibida de nanopartículas de ZnO obtenidas por síntesis acuosa. Se estudiaron valores de dopaje de Cr³⁺, determinados por espectroscopia de absorción atómica, entre 0.0088 y 2.0064 at%. Para la obtención del valor de la energía de la banda prohibida se realizaron mediciones de reflectancia difusa y el cálculo se efectuó mediante el empleo de la transformación de Kubelka-Munk combinado con el método de Tauc. Los resultados mostraron que, hasta el nivel de dopaje empleado, con el incremento de la concentración de Cr³⁺, las nanopartículas sintetizadas exhibieron un decrecimiento del valor de la energía de la banda prohibida. Esto estaría ocasionado por la formación de la solución sólida Zn_{1-x}Cr_xO donde el Cr³⁺ tendría la coordinación tetrahédrica del ZnO en lugar de la coordinación octahédrica de su óxido. Con ello es posible ajustar las propiedades ópticas del material acorde a las aplicaciones deseadas.

Palabras clave: *Nanopartículas ZnO, Dopaje con Cr, Banda prohibida.*

LA ESPECTROSCOPIA DE FOTO VOLTAJE SUPERFICIAL PARA LA CARACTERIZACIÓN DE NANOHILOS DE ZnO

Daniel Fonseca Díaz¹, María Sánchez Colina¹, Patricia Gutiérrez Zayas-Bazán²

¹ Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Investigación en Materiales. UNAM. México.

E-mail: df.218x@gmail.com

RESUMEN:

La espectroscopia de fotovoltaje superficial (SPS) se empleó para caracterizar las transiciones energéticas en nanohilos (NWs) de ZnO puros y dopados con azufre (S), crecidos sobre silicio mediante depósito químico en fase vapor (CVD). Los espectros de fotovoltaje (SPV) mostraron tres transiciones energéticas principales, identificadas mediante análisis con el método de la derivada y gráficos de Tauc, correspondientes al band gap y a niveles de defecto. Aunque el dopaje con S no indujo cambios notables en las señales de SPV o fotoluminiscencia (PL), la comparación entre ambas técnicas reveló una relación inversa: mayores señales SPV se correlacionan con menores intensidades de PL, indicativo de una reducción en la recombinación radiativa y una mejora en la separación/recolección de fotoportadores. Este estudio subraya la capacidad de la SPS para investigar sin contacto la estructura electrónica y los procesos de recombinación en NWs de ZnO, información crucial para el desarrollo y optimización de sus aplicaciones en sensado, conversión fotovoltaica y optoelectrónica.

Palabras clave: Espectroscopia de fotovoltaje superficial, Nanohilos de ZnO, Método de Tauc.

OBTENCIÓN DE UN SISTEMA NANOESTRUCTURADO BASADO EN ALBÚMINA SÉRICA HUMANA PARA SU EMPLEO EN LA TERAPIA CONTRA EL CÁNCER

Carolina Helguera Fleitas¹, Lilium Becherán Marón², Jomarien García Couce³, Carlos Romeu Carballo⁴, Eduardo Peón Avés³, Marcos Muñoz Arias¹, Nicolás Sirgado Pérez², Miriela Tomás Oviedo⁴, Gustavo Cabrera Barjas⁵

¹ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Centro de Biomateriales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ⁴ Unidad de Desarrollo e Innovación, Laboratorios AICA, BioCubaFarma, La Habana, Cuba. ⁵ Facultad de Ciencias para el Cuidado de la Salud, Universidad San Sebastián, campus Las Tres Pascualas, Concepción, Chile.

E-mail: lilium@imre.uh.cu

RESUMEN:

La complejidad de ciertas enfermedades y la toxicidad asociada con algunos tratamientos exigen formulaciones de avanzada para la administración de medicamentos. La albúmina se ha estudiado ampliamente para la obtención de nanopartículas portadoras de fármacos, con énfasis en la terapia contra el cáncer. Sin embargo, los métodos de obtención no han sido suficientemente estudiados, por lo que es necesario analizar alternativas para la preparación de estos materiales. En este trabajo se obtuvieron nanopartículas de albúmina de suero humana utilizando el método de desolvatación con etanol y analizando la variación de algunos parámetros del proceso, con el fin de preparar nanopartículas con tamaños alrededor de 200 nm. La dispersión de la albúmina se llevó a cabo con el empleo de un homogeneizador ultrasónico, un homogeneizador UltraTurrax y agitación magnética. Se estudió la influencia de la concentración de la disolución inicial de albúmina, de la relación volumétrica agua:etanol, de la velocidad de adición de etanol, de la presencia de sales, así como también de la temperatura del proceso de obtención. Las nanopartículas preparadas se entrecruzaron con glutaraldehído. La caracterización de las nanopartículas se realizó mediante microscopía electrónica de barrido, dispersión dinámica de la luz, espectroscopía infrarroja y análisis termogravimétrico. Con las condiciones más adecuadas se obtuvieron nanopartículas con tamaños entre 188 y 240 nm aproximadamente, con distribución de tamaños relativamente homogénea. Además, las nanopartículas presentaron carga superficial negativa en todas las condiciones de obtención. Las nanopartículas obtenidas presentan potencialidades para su empleo como portadoras de fármacos en la quimioterapia del cáncer.

Palabras clave: *Nanopartículas, Albúmina, Desolvatación, Nanotecnología, Biomedicina.*

EMPLEO DE DIFERENTES MÉTODOS PARA OBTENER CÁPSULAS POLIMÉRICAS COMO PLATAFORMAS DE LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS

Sheyla Bermudez Pérez¹, Yaiko Saddam Hernández Terrero², Emilio F. Acosta Medina¹, M.A. Vantsyan³, T.V. Bukreeva^{3,4}

¹ Centro de Estudios Avanzados de Cuba (CEA), CITMA, La Lisa, La Habana, Cuba. ² Centro de Inmunología Molecular (CIM), BIOCUBAFARMA, Playa, La Habana, Cuba. ³ National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia, Akademika Kurchatova pl. ⁴ A. V. Shubnikov Institute of Crystallography FSRC «Crystallography and Photonics» RAS, Moscow, Russia, Leninsky pr.

E-mail: dalishely@gmail.com

RESUMEN:

La búsqueda de sistemas poliméricos eficaces para llevar a cabo el transporte a través de la barrera hematoencefálica y la liberación controlada de principios activos; continúa siendo un área de gran investigación para la ciencia y nanotecnología. Hoy día, se investiga en los métodos de encapsulación como una alternativa menos invasiva. Sin embargo, es necesario el control riguroso del tamaño de partículas, inferior a 200 nm. Por esta razón, se diseñaron vehículos para la liberación controlada de principios activos, donde se encapsuló el marcador fluorescente DAPI (4',6-diamidino-2-fenilindol) utilizando el polímero poli- ϵ -caprolactona mediante el método de emulsión bajo diferentes condiciones de agitación: ultraturrax y punta ultrasónica, con el objetivo de optimizar el tamaño de las cápsulas. La caracterización por dispersión dinámica de la luz (DLS, de sus siglas en inglés Dynamic Light Scattering), mostró una distribución homogénea del tamaño de las cápsulas para ambos sistemas de agitación, obteniéndose dimensiones de cápsulas menores de 200 nm con la punta ultrasónica. Mediante la microscopía de fuerza atómica (AFM, de sus siglas en inglés Atomic Force Microscope), se observaron cápsulas con forma esférica. El análisis por espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FTIR, de sus siglas en inglés Fourier transform infrared spectroscopy), evidenció la presencia de los grupos funcionales característicos de la Poli- ϵ -caprolactona (PCL). Mediante la microscopía confocal de barrido láser, se comprobó la encapsulación del fluoróforo.

Palabras clave: *Liberación controlada, Fármaco, Vehículo, Fluoróforo, Encapsulación.*

CUBAN NANOMATERIALS: APPLICATIONS IN MEDICINE AND THE ENVIRONMENT

Aramis Rivera Denis¹, Dayaris Hernández Oliva¹, Irela Pérez Sánchez²

¹ Zeolites Engineering Laboratory, Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba. ² Department of Drugs Technology and Control, Institute of Pharmacy and Food (IFAL), University of Havana, Havana, Cuba.

E-mail: aramis@imre.uh.cu, aramisrivera100@yahoo.com

ABSTRACT:

Nanoclays are categorized into 2D and 1D forms based on their structure. These include layered silicates such as montmorillonite, which has layers around 1 nm thick, and palygorskite, which possesses a nanoporous structure. Based on their unique structure and properties, widespread availability, low cost, and low environmental impact, they are used in a variety of applications. They have been employed as starting materials, adjuvants, active ingredients, and vehicle materials in various fields, including *biomedical applications*, *wastewater treatment*, and *polymer composites* for food preservation. Bentonite (Bent) and palygorskite (Pal) are among the most commonly used natural clays for the applications mentioned above. The primary objective of this work is to provide a comprehensive overview of the main results achieved by our experimental research group. A range of natural and modified materials—Pal, Bent, Bent/metformin and Bent/Vitamin C—have been successfully incorporated into pharmaceutical formulations for topical applications. The results confirm the antimicrobial efficacy of chemically modified bentonites. The remineralizing and exfoliating properties of creams and gels formulated with natural Bent and Pal, as active ingredients, is also verified. The efficient use of Pal clay without any modification is evidenced in the capture of emergent contaminants such as sulfamethoxazole, and persistent pollutants like Congo red and methylene blue dyes. Finally, clay/polymer nanocomposites with potential applications in food preservation were successfully obtained from naturally abundant and sustainable materials. The addition of Bent improved the water-resistant properties of the films, which also demonstrated suitable flexibility and transparency.

Keywords: *Natural clays, Drugs, Films, Pharmaceutical formulations, Contaminants.*

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF CLAY DESHIDRATATION PROCESS

Anabel Lam¹, Carlos D. Marrero-Pérez¹, German Rojas-Lorenzo²

¹ Zeolite Engineering Laboratory, Institute of Material Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba. ² Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: anabel@imre.uh.cu

ABSTRACT:

Understanding hydration and dehydration in clays is vital for industrial and environmental applications, as these processes govern swelling, strength, and permeability—key properties in geotechnical engineering, construction, and waste containment. Advanced techniques like thermogravimetric analysis, XRD, and spectroscopy reveal structural and energetic changes during dehydration, while factors such as temperature, pressure, and interlayer cations dictate water-loss kinetics. Multiscale approaches combining experiments with computational modeling enable atomic-scale insights into free energy barriers and diffusion pathways, aiding material design for energy storage, catalysis, and barrier technologies. This study employs molecular dynamics (MD) simulations to investigate dehydration in lithium fluorhectorite clay using the *DLPOLY* code and *CLAYFF* force field (10 ns, NPT ensemble). Building on prior work exploring hydration reversibility, we analyze clay-water and cation-water interactions, focusing on their kinetic roles. Preliminary results highlight how shifts in Li⁺ coordination influence dehydration dynamics, offering insights into the material's response to cyclic hydration. By linking atomistic mechanisms to macroscopic behavior, this work advances predictive models for water retention and swelling in clay-rich soils. The findings enhance fundamental knowledge of soil behavior under variable hydration, with potential applications in optimizing engineered barriers (e.g., nuclear waste disposal) and soil stabilization. Bridging simulations with experimental data, this approach underscores the synergy between local cation dynamics and bulk clay properties, paving the way for tailored material solutions.

Keywords: *Clay, Molecular Dynamics simulations, Deshidratation Process.*

FIRST STEPS IN CATION EXCHANGE IN CLAYS: AN APPROACH FROM MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

María Fernanda Contino-Ramos¹, Anabel Lam², Carlos D. Marrero-Pérez²

¹ Cuban Center of Neurosciences, Havana, Cuba. ² Zeolite Engineering Laboratory, Institute of Material Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba.

E-mail: mcontinoramos@gmail.com

ABSTRACT:

Clays are materials of great importance in various scientific and technological fields due to their lamellar structure, high specific surface area, and cation exchange capacity (CEC). These properties make them useful in applications such as catalysis, environmental remediation, energy storage, and materials science. In particular, synthetic clays, such as lithium hectorite, allow precise control of their composition and structure, facilitating detailed studies of their physicochemical properties. This work focuses on lithium hectorite, a synthetic clay with a negative charge of $-1.2e$ per unit cell, a clay model used in previous studies to investigate the movement of lithium cations and their interaction with the clay structure. In this research, we focus on studying the cation exchange process of this clay, comparing the exchange efficiency of two cations: sodium (Na^+) and cesium (Cs^+). For this purpose, Molecular Dynamics simulations were performed using a model of lithium hectorite in which the periodicity was broken in the 010 and 001 directions. A simulation box containing two solutions of interest was added: one of sodium chloride (NaCl) and another of cesium nitrate (CsNO_3), each at two different concentrations (0.1 M and 1 M). These conditions allowed us to know the interactions involved in the first steps of the cation exchange process and to evaluate how the cation exchange capacity varies as a function of the concentration of ions in solution.

Keywords: *Clay, Molecular Dynamics simulations, Cation Exchange Process.*

ESTUDIO TEÓRICO DE LAS INTERACCIONES EN EL SISTEMA COMPUESTO LITIO-FLUORHECTORITA-TRIMETOPRIM POR DINÁMICA MOLECULAR

Luis Enrique Meireles Cruz¹, Karell Valdiviés Cruz²

¹ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: karellvc81@gmail.com

RESUMEN:

Las arcillas están llamadas a ser los materiales del siglo XXI por su abundancia, bajo costo y compatibilidad con el medio ambiente. Se usan en la industria farmacéutica como excipientes o ingredientes farmacéuticos activos. En los últimos años se destaca el uso de esmectitas como material soporte de medicamentos en sistemas de liberación controlada de fármacos. Sin embargo, las técnicas experimentales de caracterización presentan limitaciones para comprender detalles relacionados con la incorporación y adsorción de especies orgánicas. En este escenario, el uso de técnicas computacionales es una alternativa muy útil para cumplir con este propósito. En el presente trabajo se realiza un estudio del sistema compuesto Li-fluorhectorita-trimetoprim (LiFH-TMP) mediante el método de Dinámica Molecular usando el código DLPOLY. Como modelos se consideran: 1) la LiFH; 2) el sistema LiFH-TMP sin la presencia de moléculas de agua en el espacio interlamilar de la arcilla; 3) el sistema LiFH-TMP con moléculas de agua y 4) el sistema LiFH-2TMP sin moléculas de agua. En las simulaciones de Dinámica Molecular se emplean los siguientes campos de fuerza: 1) AMBER para el TMP; 2) el modelo TIP3P para las moléculas de agua y 3) el CLAYFF para la LiFH. Los resultados obtenidos tienen una buena correspondencia con los obtenidos experimentalmente.

Palabras clave: *Arcilla, Li-fluorhectorita, Trimetoprim, Dinámica molecular.*

1-(2-FUROYL)THIOUREAS 3-CICLOPROPYL AND 3,3-DIETHYL SUBSTITUTED: PRELIMINARY THEORETICAL STUDY ON THEIR RECOGNITION OF Pb²⁺ IONS

Marcia Bustamante Sánchez¹, Gabriela Sánchez Díaz², Osvaldo Estévez Hernández¹, Ana Rosa Lazo Fraga¹, Alicia Díaz García³, Mónica González Quintela¹, Marcia Viltres Portales¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Cuba. ² Faculty of Science, Department of Chemistry & Chemical Biology, Mac Master University, Hamilton, Canada. ³ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: marciahabana2016@gmail.com

ABSTRACT:

Thiourea derivatives have been reported as receptors or ionophores for heavy metal cations. Having hard and soft donor sites in their structure facilitates its versatility. In this work, density functional theory (DFT) method has been used to investigate the electronic and structural properties of two 1-(2-furoyl)thiourea derivatives: 3-ciclopropyl (FCP) and 3,3-diethyl (FDE) substituted. Furthermore, we have considered the molecular recognition of the *cis* - *trans* conformations with Pb²⁺ cation. The calculations were done at B3LYP/6-31+G(d,p) level with the Gaussian-16 program. A LANL2DZ pseudopotential was used for lead. The optimized structure, total energy, energy gap, highest occupied molecular orbital (HOMO), lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energy, ionization potential, electron affinity, chemical potential, global hardness, softness, and electrophilicity index have been calculated for both compounds. The 3-monosubstituted FCP ligand has an intramolecular hydrogen bond between N₃H and carbonyl oxygen atom, displaying smaller energy gap and larger values for both softness and electrophilicity index as compared with FDE. These results point to a larger reactivity of FCP. In particular, the remarkable difference for electrophilicity index values indicate FCP could not be suitable as ionophore towards an electrophile, e.g. Pb²⁺ ions. The results support the bad sensibility value (16 mV/dec vs 29,57 mV/dec for a divalent cation, according to Nerst) obtained for constructed Pb²⁺ selective electrodes based on FCP as receptor.

Keywords: *1-(2-Furoyl)thioureas, Ion Selective Electrodes, DFT, Frontier Molecular Orbitals, Global Reactivity Parameters.*

EMISIÓN ELECTRÓNICA EN SUPERFICIES CATÓDICAS DE TUNGSTENO CONTAMINADAS CON CARBONO Y OXÍGENO MEDIANTE EL PROGRAMA SIESTA

Mitchel Rodríguez Silva, Maykel Márquez Mijares

Instituto de Ciencias y Tecnologías Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: mitchelrzs99@gmail.com

RESUMEN:

Se estudió el impacto de la contaminación con carbono, oxígeno y su efecto conjunto sobre la emisión electrónica de campo en cátodos de tungsteno utilizados en inyectores de partículas neutras para reactores de fusión nuclear. Mediante cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) utilizando el software SIESTA, se modeló una superficie de tungsteno (W) de tres capas atómicas con un vacío de 20 Å, sobre la cual se adsorbieron átomos individuales de carbono y oxígeno en los sitios T (top), B (bridge) y H (hollow). Se evaluó el trabajo de extracción y la configuración más estable para contaminaciones de hasta 1 monocapa (1ML). Los resultados indican que la presencia de carbono reduce la emisión electrónica en todos los sitios de adsorción, mientras que el oxígeno produce efectos similares salvo en el sitio H, donde favorece la emisión. En el caso de contaminación conjunta, la configuración en la que el carbono está unido a la superficie muestra el mayor aumento en el trabajo de extracción, resultando ser la más estable, mientras que la configuración inversa reduce este trabajo y favorece la emisión electrónica. Estos hallazgos son relevantes para optimizar la eficiencia de los cátodos en entornos de fusión nuclear, resaltando la influencia crítica de la contaminación superficial en el desempeño del material.

Palabras clave: Emisión electrónica, SIESTA, Superficie W, Contaminación C, Contaminación O.

PREPARACIÓN DE CAPAS DELGADAS Y HETEROESTRUCTURAS DE ÓXIDOS DE MOLIBDENO

Yon Leandro Leibas López¹, Andreas Ruediger², Osvaldo de Melo Pereira³

¹ Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Institut National de la Recherche Scientifique, Centre Énergie, Matériaux, Télécommunications, Québec, Canada. ³ Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México.

E-mail: yonleandroleyvaslopez@gmail.com

RESUMEN:

Este estudio presenta la deposición selectiva de un compuesto $\text{Mo}_5\text{O}_{14}/\text{MoO}_3$ sobre una película de MoO_2 previamente crecida mediante CD-ICSVT. La caracterización se llevó a cabo mediante difracción de rayos X, espectroscopia Raman y microscopía electrónica de transmisión. La técnica implementada consistió en someter la película de MoO_2 a vapores de MoO_3 en condiciones de bajo vacío. Los resultados revelaron un crecimiento selectivo significativo, con la formación del compuesto $\text{Mo}_5\text{O}_{14}/\text{MoO}_3$ ocurriendo exclusivamente en la superficie de MoO_2 , mientras que el MoO_3 puro se depositó directamente sobre la parte expuesta del sustrato empleado, SiO_2/Si . La formación del compuesto se reveló mediante difracción de rayos X y espectroscopia Raman. La deposición selectiva del compuesto se atribuye a una reacción en estado sólido entre el MoO_3 y el MoO_2 en su interfaz, facilitada por la estructura porosa de la película de MoO_2 , como se evidenció mediante microscopía electrónica de barrido. Consideraciones termodinámicas respaldan este mecanismo de reacción y predicen el rango de temperatura en el cual puede ocurrir la reacción.

Palabras clave: *Óxidos de molibdeno, Deposición de vapor, Difracción de rayos X, Espectroscopia Raman, Microscopía electrónica de transmisión, Fonones.*

CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS OF 2-(3'-NITROPHENYL)- BENZIMIDAZOLE

**Daimí González Caballero¹, Mayra P. Hernández Sánchez¹, Armando A. Paneque Quevedo²,
Julio Duque Rodríguez¹, Javier Alcides Elena³, Pedro Henrique de Oliveira Santiago³**

¹ Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba. ² Faculty of Chemistry, University of Havana, Havana, Cuba. ³ São Carlos Institute of Physics, University of São Paulo, São Paulo, Brazil.

E-mail: daimi.gonzalez@imre.uh.cu

ABSTRACT:

The 2-phenyl-benzimidazoles are heterocyclic compounds that have been extensively studied for their applications in chemistry, biology, and materials science. Understanding the crystalline structure and structural characteristics of these compounds may provide insights into predicting their biological properties in features study. This work details the crystallographic characterization of 2-(3'-nitrophenyl)-benzimidazole, a compound not previously reported. The 2-(3'-nitrophenyl)-benzimidazole was synthesized through the conventional method, involving the reaction between benzaldehyde and o-phenylenediamine in an acetonitrile solvent. The compound was characterized by NMR. Single crystals suitable for X-ray diffraction analysis were obtained by slow evaporation from an acetonitrile solution, with dimensions of 0.26×0.16×0.08 mm³. Data collection was performed at a steady temperature of 199.99(10) K. The structure was solved using the intrinsic phasing solution method and the model was refined by least squares minimisation. The compound crystallizes in the triclinic system, space group $P\bar{1}$ (No. 2), with four molecules per unit cell. The molecules pack within the unit cell along the 'a' axis. The lattice parameters are $a = 7.71690(10)$ Å, $b = 7.72790(10)$ Å, $c = 22.1425(4)$ Å, $\alpha = 83.171(2)^\circ$, $\beta = 85.664(2)^\circ$, $\gamma = 65.266(2)^\circ$, with a cell volume of 1190.34(4) Å³. The crystal structure reveals water molecules packed within, forming intermolecular hydrogen bond of N-H-O with distances N-O of 2.849(3) Å and 2.776(5) Å; and O-H-N with distances O-N of 2.857(4) Å, 2.995(3) Å, 2.923(5) Å, 2.903(4) Å, 2.674(7) Å, respectively.

Keywords: 2-(3'-nitrophenyl)-benzimidazole, Crystal structure, Triclinic system, Intermolecular hydrogen bond.

ESTUDIO DE LA EMISIÓN ELECTRÓNICA DEBIDO A LA CONTAMINACIÓN NO HOMOGÉNEA DE CARBONO EN LA SUPERFICIE DE CÁTODOS DE TUNGSTENO

Carlos Rafael González Alejo, Maykel Márquez Mijares

Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: carlosr301101@gmail.com

RESUMEN:

Se ha investigado el impacto de la contaminación no homogénea y la posible formación de nanopicos de carbono sobre una superficie de tungsteno W(100), en la emisión electrónica en cátodos, componentes críticos en los inyectores de partículas neutras para futuros reactores de fusión nuclear. Empleando la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), herramientas computacionales (SIESTA) y el uso de (PYTHON) para la visualización y ajuste de los datos, se modelaron superficies de tungsteno contaminadas con configuraciones no homogéneas de carbono.

Palabras clave: *Emisión electrónica, Superficies catódicas, Contaminación no homogénea, Tungsteno.*

INFLUENCIA DE LA RADIACIÓN GAMMA EN LAS PROPIEDADES ÓPTICAS DE PUNTOS DE CARBONO DOPADOS CON NITRÓGENO

Janser Hernández Ojeda¹, Luis Enrique Guerra Castaño¹, Luis Felipe Desdín García²

¹ Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear, La Habana, Cuba.

E-mail: janserhernandezojeda3011@gmail.com

RESUMEN:

Los puntos de carbono (CDs) son nanopartículas cuasi-esféricas con dimensiones inferiores a 10 nm. Muestran un efecto de confinamiento cuántico, que implica, para este tipo de materiales, una absorción en el UV-visible y una fuerte emisión ajustable en todo el rango visible. Esta propiedad, sumada a su alta fotoestabilidad y baja toxicidad, han permitido la aplicación de los CDs en bioimagenología, fotocatalisis, fotodegradación y fotodetección. Como parte de la presente investigación, se ha evaluado el efecto de la radiación gamma sobre la intensidad y longitud de onda de emisión de CDs dopados con nitrógeno en disolución acuosa. Las nanopartículas fueron sintetizadas a partir de ácido cítrico y urea mediante microondas. Para la irradiación se empleó una fuente de ⁶⁰Co, aplicándose dosis entre de 1 y 10 kGy. Estos CDs presentan dos bandas de emisión. En la medida que aumentó la dosis de radiación, la primera banda mostró desplazamientos batocrómicos y la segunda, desplazamientos hipsocrómicos, hasta llegar a solaparse; de forma tal que la resolución del equipo solo permitió identificar una banda de emisión. Este efecto se observó entre 2 y 4 kGy. En este rango se logró un incremento de la intensidad de fluorescencia debido al solapamiento de las bandas. En la medida que la dosis de radiación continuó aumentando, las respectivas bandas comenzaron a separarse nuevamente. Los resultados obtenidos demuestran la posibilidad de variar la longitud de onda de emisión de los CDs dopados con nitrógeno, así como incrementar su intensidad de fluorescencia, lo cual favorece sus disímiles aplicaciones.

Palabras clave: *Puntos de carbono, Radiación gamma, Intensidad de fluorescencia, Longitud de onda de emisión.*

Comisión: Materiales para la sostenibilidad y aplicaciones medioambientales

Conferencias invitadas

CLAY-POLYMER FILMS FOR SUSTAINABLE FOOD PACKAGING

Aramis Rivera Denis

Zeolites Engineering Laboratory, Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba.

E-mail: aramis@imre.uh.cu, aramisrivera100@yahoo.com

ABSTRACT:

Due to the environmental issues caused by plastic waste, there is a growing demand in the development of biodegradable and antimicrobial nanocomposite materials. Traditional food preservation films are highly susceptible to contamination by harmful microbes. Active packaging serves as an effective alternative, reducing the need for chemical preservatives in food while maintaining quality and extending shelf life. Most research is focused on replacing conventional plastic packaging with biodegradable materials that have similar properties and are low in cost. In this regard, natural clay and polymer-based films emerge as sustainable alternatives. Layered nanoclays are widely utilized as reinforcing agents in polymer nanocomposites. In particular, natural or modified bentonite clay is highly regarded for its practicality and effectiveness. As a layered silicate, it significantly enhances the mechanical, barrier, and thermal properties of nanocomposites compared to conventional polymers. However, the preparation of films can be a complex process, as it depends on the chemical compatibility between the polymer matrix and the clay, as well as the homogeneous dispersion of the clay within the polymer. Several synthesis strategies and preparation methods are discussed in the literature. The main goal of this contribution is to provide an overview of clay-polymer nanocomposites, along with their synthesis methods and applications.

Keywords: *Clay, Polymer, Films, Sustainable nanacomposite, Food packaging.*

NEREA® ZEOLITIC NANOSTRUCTURED MATERIALS vs NPK FERTILIZER MIXED WITH NATURAL ZEOLITES

**Gerardo Rodríguez-Fuentes, Inocente Rodríguez-Iznaga, Lorenzo A. Rivero González,
Ernesto L. Rivero Robaina**

Laboratorio de Ingeniería de Zeolitas Naturales (NatZEng®), Instituto de Ciencia y
Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: gerardo@imre.uh.cu, gerardorodriguezfuentes2@gmail.com

ABSTRACT:

The most widespread practice of using natural zeolites in agriculture is their application directly to the soil, and in mixture with NPK chemical fertilizers, due to their easy industrial processing and low operating costs. However, the results of their use in crops are not observed in short time, while the reproducibility of the results is not entirely positive. The effect on crop yields depends of several variables that are beyond the control of the product. A NPK fertilizer requires water to be solubilized and make the nutrients available for plants. If zeolite particles are present, then only a part of these nutrients can be retained by them. NEREA® technology allows the production of nanostructured zeolitic materials. Its foundation is the fact that zeolites are naturally part of the soils, so their incorporation into these does not represent ecological damage. The distinction is to introduce steadily into the zeolite particles all the nutrients. Each NEREA® particle contains homogeneously and optimally the nutrients that only plants take up modifying the architecture and morphology of their roots, or directly by the stomata and leave cells. If the mechanical mixing of zeolite mineral particles with chemical fertilizers has represented an important contribution to agriculture, NEREA® products solve its shortcomings, and represent an innovation for agriculture and zeolite science. This work aims to demonstrate this hypothesis comparing the results of several authors who mixed Cuban natural zeolites with NPK to fertilize beans, rice, potatoes, tomatoes, and sugar cane crops, with the results obtained using NEREA® products.

Keywords: *Natural zeolite, Nanostructured material, Nutrients, Plants.*

Presentaciones Orales

INFLUENCIA DE LA CRISTALINIDAD DE LA DIFURFURILIDENTRIUREA EN LA FERTILIZACIÓN DEL CULTIVO DE TOMATE

Ariel Martínez García¹, Mayra González Hurtado¹, Ricardo Martínez Sánchez¹, Farah M. González Userralde²

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Investigaciones Hortícolas "Liliana Dimitrova" (IIHLD), Quivicán, Mayabeque, Cuba.

E-mail: arielmq@imre.uh.cu

RESUMEN:

La difurfurilidentriurea (DFTU) es un fertilizante de liberación lenta, formado por la condensación de dos moléculas de furfural con tres de urea. En condiciones favorables se hidroliza y como consecuencia se libera al medio la urea y el furfural, por lo que al emplearse en la agricultura se logra un doble efecto, la incorporación de nitrógeno al suelo y la posible acción del furfural como nematocida y fungicida. La DFTU se puede producir por diferentes métodos de síntesis y siempre se obtiene el mismo producto, independientemente de la relación molar inicial de los reactivos, sin embargo, la cristalinidad y la morfología pueden variar. En este trabajo se empleó el método de síntesis en fase homogénea (método de extracción y evaporación del disolvente). Los reactivos utilizados fueron la urea fertilizante, el furfural sin previa purificación y el agua como disolvente. Los resultados obtenidos por difracción de rayos X mostraron una ligera diferencia en la cristalinidad del producto dependiendo de la relación molar de los reactivos de partida. La morfología se estudió por microscopía electrónica de barrido observándose una elevada superficie irregular de gránulos semiesféricos y formación de agregados. Los resultados del estudio en campo en cultivos de tomate, mostraron resultados similares en comparación con los fertilizantes tradicionales, a pesar de que la DFTU sólo se aplica una vez al inicio de la siembra y presenta un menor contenido de nitrógeno.

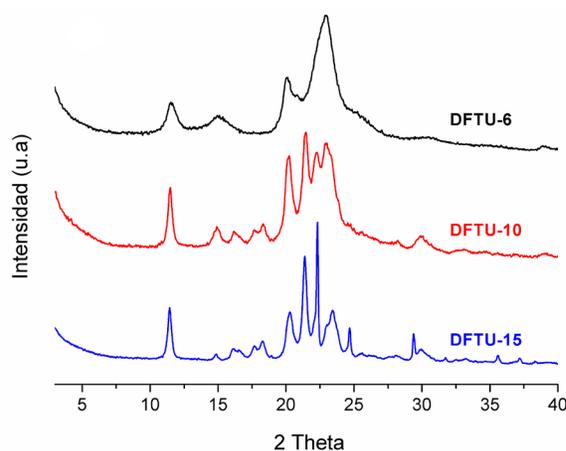


Figura: Diffractogramas de rayos X de los productos DFTU

Palabras clave: Fertilizante de liberación lenta, DFTU, Urea, Furfural.

DESARROLLO DE BIOFERTILIZANTES DE LIBERACIÓN LENTA A PARTIR DE LA MICROALGA SPIRULINA PARA UNA AGRICULTURA ECOLÓGICA

Abdel Alimonta¹, Mayra González¹, Edenia Fernández², Farah González³, Augusto Iribarren¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Ingeniería e Investigaciones Químicas, La Habana, Cuba. ³ Instituto de Investigaciones Hortícolas “Liliana Dimitrova”, Mayabeque, Cuba.

E-mail: abdel.alimonta@imre.uh.cu

RESUMEN:

La reducción del uso de fertilizantes y pesticidas químicos para lograr una agricultura sostenible se ha convertido en una prioridad en tiempos recientes. Una de las soluciones exploradas es el empleo de biofertilizantes de liberación lenta que utilizan productos de origen natural como principio activo para desarrollar una agricultura a bajo costo, respetando la naturaleza y el desarrollo sostenible. En esta investigación, se desarrollaron biofertilizantes de liberación lenta utilizando el método de microencapsulación por extracción y evaporación del solvente. La microalga de origen natural *Spirulina plantensis* fue encapsulada en una matriz de urea-formaldehído, mediante dos técnicas de agitación, agitación mecánica (AM) y Ultra Turrax, lo que resultó en dos biofertilizantes, (UFM+SpAM) y (UFM+SpUT). Estos se caracterizaron mediante FTIR, DRX y SEM. Fueron realizados estudios de liberación de nutrientes *in vitro*. Además, se realizaron evaluaciones agronómicas en casa de cultivo protegido sobre tomates. Se corroboró la nula interacción entre el principio activo y la matriz polimérica. Se reveló la estructura amorfa de los materiales. Los perfiles de liberación resultaron ser típicos de fertilizantes de liberación lenta, lo que sugiere un suministro prolongado de estos nutrientes a las plantas. Se observó una diferencia en la morfología de los productos donde el UFM+SpUT presentó una superficie heterogénea e irregular en contraste con la superficie lisa y uniforme del UFM+SpAM. Los estudios *in vivo* mostraron que se necesitó solo una aplicación de los biofertilizantes durante el ciclo vegetativo para obtener efectos comparables y en algunos casos superiores a los de un fertilizante convencional.

Palabras clave: Fertilizante, *Spirulina*, Urea, Liberación sostenible.

OBTENCIÓN DE NANOCOMPÓSITOS SÍLICE-LIGNINA A PARTIR DE CÁSCARA DE ARROZ Y PERGAMINO DE CAFÉ COMO ADSORBENTES DE METALES PESADOS

**Carlos Rafael Castillo Hernández¹, Juan Pablo Figueroa Macías¹, Dayana Mesa Tejeda¹,
Bárbara Maybel Cabrera Carrillo¹, Yaneris Mirabal Gallardo², Yamilet Coll García¹**

¹ Centro de Estudios de Productos Naturales, Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Facultad de Ingeniería, Instituto de Química Aplicada, Universidad Autónoma de Chile, Talca, Chile.

E-mail: carlos.castillo@fq.uh.cu

RESUMEN:

Los residuos de la producción de arroz y café constituyen un importante contribuyente a la contaminación ambiental. Entre los residuos generados más importantes se encuentran el pergamino de café y la cáscara de arroz, que destacan por su elevado contenido de lignina y sílice lo cual permite la obtención de compósitos con una estructura porosa, lo que unido a las propiedades fisicoquímicas de la lignina permitiría su posible aplicación como adsorbente de metales pesados. Con este fin se realizó la síntesis de nanocompósitos mediante un método sol-gel *in situ*, partiendo de los materiales lignocelulósicos. Los nanocompósitos obtenidos fueron caracterizados mediante FT-IR, microscopía electrónica y análisis termogravimétrico. Se estudió la capacidad de adsorción de las nanopartículas obtenidas mediante un experimento de adsorción en lotes frente a disoluciones de Cu(II) y Ni(II). Se encontró mediante espectroscopía electrónica que las nanopartículas presentan una forma quasiesférica y tamaños alrededor de 60 nm. El análisis espectroscópico mediante FT-IR mostró la presencia tanto de lignina como de sílice en los nanocompósitos, lo cual fue corroborado mediante el análisis termogravimétrico y la EAA-ICP. Además, se evaluó la capacidad de sorción del nanocompósito frente al Cu(II) y el Ni(II), encontrándose que los nanocompósitos adsorben los iones con rapidez y presentan capacidades de sorción alrededor de 10 mg/g en todos los casos. De aquí se puede concluir que a partir de cáscara de arroz y pergamino de café se pueden obtener nanomateriales como potenciales sorbentes renovables alternativos para la eliminación de contaminantes ambientales.

Palabras clave: *Nanocompósitos sílice-lignina, Síntesis sol-gel, Residuos agrícolas, Adsorción, Metales pesados.*

CARACTERIZACIÓN PRELIMINAR DE RESIDUOS DE CAFÉ CUBANO: UNA OPORTUNIDAD PARA LA INNOVACIÓN SOSTENIBLES

Dayana Mesa Tejeda¹, Juan P. Figueroa Macías¹, Amanda Collazo Aldana¹, Carlos R. Castillo Hernández¹, Harold A. Nuñez Williams¹, Yamilet Coll Garcia¹, Dayamí Viltres Barbán², Yaneris Mirabal Gallardo³

¹ Centro de Estudios de Productos Naturales (CEPN), Facultad de Química, Universidad de la Habana, Cuba. ² Estación Experimental Agroforestal Tercer Frente, Tercer Cruce de los Baños, Frente, Santiago de Cuba, Cuba. ³ Universidad Autónoma de Chile, Talca, Chile.

E-mail: dayana.mesa@fq.uh.cu

RESUMEN:

El café es una de las bebidas más consumidas a nivel mundial. En su agroindustria, se generan grandes cantidades de residuos que pueden representar más del 70% de la producción total. Estos residuos contribuyen a la contaminación y a problemas ambientales, ya sea por su quema o por su alto contenido de compuestos perjudiciales. Recientemente, muchas investigaciones se han centrado en la transformación química de estos residuos agrícolas en productos de alto valor agregado, aplicando un modelo de economía circular. Por lo tanto, es fundamental conocer su composición química para futuras aplicaciones. En esta investigación, se caracterizaron física, química y fisicoquímicamente tres tipos de residuos de la producción de café arábico cubano: cáscara, pergamino y borra. Se emplearon diversas técnicas para corroborar la presencia de celulosa, hemicelulosa, lignina y silicio en los residuos, utilizando métodos como TGA, IR y el método de Chesson-Datta. A través de EDX, se observó que las biomásas están compuestas principalmente de carbono y oxígeno, además de contener minerales. Los resultados obtenidos de la determinación de pH, densidad y contenido de cenizas de los residuos estudiados difieren en muchos casos de los reportados en la literatura. Finalmente, se determinó el contenido extractivo y se realizó un tamizaje fitoquímico para identificar los principales grupos de metabolitos secundarios presentes en estos residuos de café. Estos hallazgos demuestran la variada composición química de los residuos de café y su dependencia del clima, las condiciones del suelo y el uso de fertilizantes o insecticidas.

Palabras clave: *Cáscara, pergamino y borra de café, Economía circular, Caracterización.*

OBTENCIÓN Y COMPARACIÓN ESTRUCTURAL DE NANOPARTÍCULAS DE LIGNINA OBTENIDAS A PARTIR DE LOS RESIDUOS DEL CAFÉ

Amanda Collazo Aldana, Dayana Mesa Tejeda, Carlos R. Castillo Hernández, Yamilet Coll García, Juan P. Figueroa Macías

Centro de Estudios de Productos Naturales, Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: acollazoaldana@gmail.com

RESUMEN:

El café constituye la segunda materia prima más comercializada del planeta, de la cual solo se emplea el 9.5% en peso del fruto seco en la elaboración de la bebida. Entre las características fundamentales de estos residuos se encuentra el elevado contenido de material lignocelulósico, que permite su revalorización en varias aplicaciones: como material de partida en biorrefinerías y para la síntesis de carbón activado, también aplicados, tanto directamente como modificados, como adsorbentes de contaminantes en el agua. Actualmente los materiales lignocelulósicos son objeto de estudio de numerosas investigaciones. Por lo que, el objetivo de este estudio es comparar estructuralmente las ligninas extraídas de los diferentes residuos del café (borra, pergamino y cáscara). Se realizó un estudio previo a las diferentes materias primas a través del método Chesson-Datta, el cual se basa en la diferencia entre las propiedades químicas y la solubilidad de los principales componentes del material: lignina, celulosa y hemicelulosa, permitiendo la disolución selectiva de cada uno de estos componentes. La extracción se llevó a cabo mediante un método soda, este método se empleó previamente en la síntesis de nanopartículas de lignina utilizando como material de partida otros residuos agrícolas como la cáscara de arroz y de trigo. El resultado del estudio realizado a los materiales empleados está en relación con los resultados en los rendimientos de extracción de las ligninas. Se obtuvo un mayor rendimiento en la extracción realizada al pergamino, luego le sigue la borra y por último la cáscara de café. La caracterización de la lignina sódica de los tres materiales se realizó mediante FTIR, TGA, SEM-EDS y RMN¹H. Donde se observaron cambios en la morfología y la resistencia térmica de las diferentes ligninas obtenidas. Los resultados obtenidos luego de la caracterización verifican como varía la estructura de la lignina cuando se varía el material de partida.

Palabras clave: *Lignina, Soda, Residuo, Café.*

LA ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCENCIA APLICADA A LA DETECCIÓN DE LESIONES DERMATOLÓGICAS. ASPECTOS A CONSIDERAR PARA EL DESARROLLO DE UNA TECNOLOGÍA PROPIA

Bradies Joaquín Lambert Navarrete¹, Rubén Joel Díaz Astráin², Fresnel Forcade Zamora¹, Osmel René Cruzata Montero¹, José Antonio Rodríguez Pérez¹, Noeldris López López³, Ivette Ravelo Cabrera¹, Oscar Nápoles Rivas¹, Ricardo Milián Pila¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

² Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: bradies@imre.uh.cu

RESUMEN:

La piel es el tejido humano más estudiado por métodos ópticos en la práctica médica, debido a su fácil acceso y a que muchas de sus condiciones patológicas aparecen “a flor de piel” y se aprecian “a simple vista”. Durante el desarrollo de las patologías y lesiones dermatológicas, las alteraciones son apreciables y diferenciables, tanto en sus propiedades ópticas directas como en su respuesta de fluorescencia a estímulos luminosos específicos. Este hecho no facilita el diagnóstico ni evita errores en su evaluación. La espectroscopia de fluorescencia es una herramienta de diagnóstico de alta sensibilidad aplicable en la detección, diagnóstico y seguimiento de algunos tipos de lesiones en la piel. Su aplicación depende de factores médicos y biológicos, como la pigmentación, la morfología, la localización, la edad, y la etapa de crecimiento de las lesiones. También depende de factores relacionados con la tecnología y de los parámetros físicos de la excitación y de la autofluorescencia inducida por ella, como longitud de onda e intensidad. En este trabajo revisamos aspectos médicos y tecnológicos fundamentales para establecer criterios técnicos, operacionales y de diseño, que permiten desarrollar un dispositivo biomédico orientado a la detección y diagnóstico del cáncer de piel no melanoma (NMSC, por sus siglas en inglés). Posee un emisor LED de luz ultravioleta para inducir la autofluorescencia de los cromóforos presentes en la lesión, y un sensor de imagen capaz de registrarla y cuantificarla. Esta combinación permite realizar un diagnóstico primario no invasivo mediante espectroscopia de autofluorescencia, con un concepto novedoso desde el punto de vista de la detección.

Palabras clave: *Dermatología, Fluorescencia, Espectroscopia, Emisor, LED.*

DESARROLLO DE UN EMISOR BLANCO-UV CON CONTROL LED POR ARDUINO PARA DIAGNÓSTICOS DERMATOLÓGICOS

Rubén Joel Díaz Astrain¹, Bradies Joaquín Lambert Navarrete², Fresnel Forcade Zamora²

¹ Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Cuba.

E-mail: jdiazastrain@gmail.com

RESUMEN:

El diagnóstico temprano de enfermedades de la piel mediante métodos poco invasivos es uno de los principales desafíos en dermatología. La técnica de dermatoscopia se destaca por su eficacia en este ámbito, empleando dermatoscopios con fuentes de luz que facilitan el diagnóstico y seguimiento de enfermedades cutáneas. Este trabajo presenta un dispositivo innovador que integra tres conjuntos de diodos emisores de luz LEDs (blanco, ámbar y ultravioleta) diseñados para activar fluoróforos específicos en la piel, permitiendo una mejor identificación y análisis de lesiones. El objetivo principal es proporcionar una solución accesible y eficiente para el diagnóstico dermatológico. La combinación de luz blanca, ámbar y ultravioleta permite explorar las características de las lesiones cutáneas de manera más completa, mejorando la precisión del diagnóstico y monitoreo de enfermedades como dermatitis, psoriasis y cáncer de piel. Para controlar la intensidad y frecuencia de los LEDs, se seleccionó un microcontrolador Arduino y se desarrolló un programa personalizado. Esta tecnología representa una innovación significativa en el uso de bajo costo para mejorar la salud dermatológica, con potencial impacto en la detección temprana y tratamiento de afecciones cutáneas, promoviendo mayor accesibilidad y eficiencia en el ámbito médico.

Palabras clave: *Dermatoscopia, LED, Programación Arduino, Diagnóstico Cutáneo.*

EVALUACIÓN DEL “CONVERTIDOR LUZ A DIGITAL” MONOLÍTICO, DE BAJO COSTO, TCS3400, PARA LA DETECCIÓN DE AUTOFLUORESCENCIA EN LESIONES DERMATOLÓGICAS

Bradies Joaquín Lambert Navarrete¹, Rubén Joel Díaz Astráin², Fresnel Forcade Zamora¹, Osmel René Cruzata Montero¹, José Antonio Rodríguez Pérez¹, Noeldris López López³, Ivette Ravelo Cabrera¹, Oscar Nápoles Rivas¹, Ricardo Milián Pila¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

² Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: bradies@imre.uh.cu

RESUMEN:

Se evalúa el “Convertidor de Luz en Color a Digital” (“Color Light to Digital Converter”) TCS34000”, para su uso en la detección de autofluorescencia en lesiones dermatológicas asociadas al cáncer tipo NMSC. Este dispositivo de bajo costo permite la detección de luz ambiental, incluida la detección de luz roja, verde, azul, clara e infrarroja. Entre sus aplicaciones se encuentra la determinación de la temperatura de color y el control de procesos industriales, de forma general. En los resultados de nuestras investigaciones no encontramos, hasta este momento, reportes de su aplicación en el diagnóstico dermatológico. Sin embargo, su capacidad para medir con precisión el color y la información espectral, puede contribuir a registrar, cuantificar y evaluar los cambios en la intensidad de la autofluorescencia de zonas dañadas de la piel, al ser iluminada por luz UV durante el seguimiento médico. En este trabajo analizamos las características y parámetros optoelectrónicos fundamentales de este dispositivo, así como la posibilidad de integrarlo a un sistema biomédico para el registro, cuantificación y clasificación de lesiones dermatológicas. Establecemos una comparación con técnicas fundamentales para el diagnóstico dermatológico, como la espectroscopia de fluorescencia, así como de la composición instrumental de las mismas, para llegar a conclusiones preliminares sobre el uso de este dispositivo en el desarrollo de una tecnología de nuevo tipo para el diagnóstico dermatológico.

Palabras clave: *Convertidor, Detección, Autofluorescencia, Dermatología, Diagnóstico.*

IMPLEMENTACIÓN DE UN SISTEMA PARA LA CARACTERIZACIÓN DE LED CON APLICACIONES EN FOTOMEDICINA

Fresnel Forcade, Bradies Lambert, Osmel Cruzata, José A. Rodríguez, Ivette Ravelo,

Oscar Nápoles

Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: henrisharp@gmail.com, ffz@imre.uh.cu

RESUMEN:

En las últimas décadas la biomedicina basada en la luz ha tenido un gran impacto en la atención médica moderna debido a su precisión en la biodetección y el tratamiento, la aplicación mínimamente invasiva y los efectos secundarios relativamente bajos. Las fuentes de luz como los diodos emisores de luz (LED) y láseres han sido ampliamente utilizadas por su alta precisión y selectividad del tratamiento. En particular, la fotomedicina basada en LED ofrece ventajas distintivas, incluyendo la capacidad de irradiar zonas mayores que los láseres y una mayor seguridad por su baja intensidad. Sin embargo, la selección y aplicación de los LED en la fotomedicina, depende de sus principales características: su espectro de irradiancia e irradiancia total en un área. Este proyecto cuenta de varias etapas. La presente etapa se enfoca en la estimación de la irradiancia de los LED. Para lograr este objetivo se diseñó un sistema de caracterización de LED. Se elaboró un soporte de LED y un cilindro que permitiera ajustar las distancias de iluminación. Las mediciones fueron hechas con un monocromador MDR-2, un fotodiodo calibrado y un multímetro Agilent 45. Para probar la validación del sistema se seleccionaron dos lámparas comerciales de fotopolimerización Y y N. Con el sistema se estimó que las lámparas Y y N tienen un máximo de irradiancia en 458 y 452 nm, y una irradiancia de 900 mW/cm² y 710 mW/cm² a 1 cm de distancia, respectivamente. Los métodos de estimación empleados cumplieron con el objetivo propuesto.

Palabras clave: *Fotomedicina, LED, Espectro de irradiancia, Irradiancia absoluta.*

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BIOPOLÍMEROS DE ALGINATO DE SODIO

Maybelline Lisbeth Torres Rondon, Danaee Maria López Ortiz

Instituto Tecnológico de Santo Domingo (INTEC), Santo Domingo, República Dominicana.

E-mail: maybeline.torres@intec.edu.do, danaee.lopez@intec.edu.do

RESUMEN:

El desarrollo de biopolímeros representa una alternativa sostenible frente a los polímeros sintéticos convencionales, contribuyendo así a la mitigación del impacto ambiental asociado con el uso de plásticos derivados del petróleo. En este estudio, se sintetizaron biopelículas a partir de alginato de sodio, un polisacárido abundante en las paredes celulares del alga parda *Sargassum spp.*, mediante un proceso de polimerización. Se prepararon soluciones de alginato de sodio al 2% (m/v) y cloruro de calcio al 2.5 % (m/v), en moldes específicos, seguido de un secado a temperatura ambiente en un desecador, obteniéndose la biopelícula. Se evaluaron las propiedades físico-mecánicas de las biopelículas obtenidas, como la caracterización de estas mediante espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), que indicó que la estructura de las biopelículas presenta similitudes con la del celofán, polímero derivado de la celulosa. Se determinó que la densidad es de 1.17 g/mL y un pH de 9.20, parámetros que pueden influir en la biodegradabilidad y estabilidad del material. Las pruebas de combustión demostraron rápida ignición, emisión de humo blanco y una deformación permanente del material. Las propiedades mecánicas se evaluaron a partir de los ensayos de tracción, según la norma ASTM D882. En términos de propiedades mecánicas, las biopelículas exhibieron una resistencia a la tracción máxima de 0.16 MPa, desplazamientos de 72.53 mm, y deformación de 0.73 mm/mm, lo que sugiere características comparables al polietileno espumante (foam). Los resultados obtenidos permitieron recomendar la optimización de la formulación para ampliar la viabilidad comercial de la biopelícula y sostenibilidad ambiental.

Palabras clave: Biopolímero, Alginato de sodio, Biodegradabilidad, Caracterización, Sostenibilidad.

CLINOPTILOLITA NATURAL MODIFICADA COMO CATALIZADOR FOTO-FENTON CON LUZ VISIBLE EN LA INACTIVACIÓN DE *E. COLI*

**Katia Borrego-Morales¹, A. Rabdel Ruiz-Salvador², Nuria Núñez Álvarez³, Menta Ballesteros⁴,
Tania Farías¹**

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Universidad Pablo de Olavide, Sevilla, España. ³ Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (ICMS), CSIC, Sevilla, España. ⁴ Departamento de Biología Molecular e Ingeniería Bioquímica, Universidad Pablo de Olavide, Sevilla, España.

E-mail: katiaborrego@gmail.com

RESUMEN:

La contaminación hídrica, agravada por el vertido del 80 % de aguas residuales sin tratar, plantea un desafío crítico. Los procesos de oxidación avanzada, como Fenton y foto-Fenton, son eficaces para eliminar contaminantes y microorganismos patógenos. El uso de catalizadores heterogéneos amplía el rango de pH operativo y reduce la generación de lodos. En este trabajo se diseñaron catalizadores zeolíticos basados en clinoptilolita natural (NZ) y se evaluó su actividad fotocatalítica en la inactivación de la bacteria modelo *E. coli*. Los catalizadores se obtuvieron por intercambio iónico con Fe²⁺ y Cu²⁺ (NZ-Fe-Cu) y por deposición de nanopartículas de óxidos de hierro sintetizadas por impregnación y precipitación (NZ@FeO-imp y NZ@FeO-prec), se caracterizaron por DRX, FTIR, SEM/EDS y UV-Vis de reflectancia difusa. En los ensayos foto-Fenton se empleó una concentración inicial de bacteria de 10⁶ UFC/mL, 100 ppm de H₂O₂, 1g/L de catalizador y radiación visible de 9 W. Los resultados confirmaron la estabilidad estructural de las zeolitas y la incorporación efectiva de metales y nanopartículas. Todos los catalizadores lograron la inactivación total de *E. coli* sin recrecimiento bacteriano, alcanzando reducciones logarítmicas de 4.34-log, 4.47-log y 4.24-log para NZ-Fe-Cu, NZ@FeO-imp y NZ@FeO-prec, respectivamente. El catalizador NZ-Fe-Cu resaltó por su desempeño superior logrando inactivar la bacteria en 60 minutos. Los catalizadores con nanopartículas depositadas lograron inactivaciones de 75 minutos (NZ@FeO-imp) y 120 minutos (NZ@FeO-prec). Estas diferencias se atribuyen a la morfología de las nanopartículas, comprobándose que las esféricas obtenidas por impregnación son más activas que las nanoagujas obtenidas por el método de precipitación.

Palabras clave: Zeolitas, Catalizadores heterogéneos, Procesos foto-Fenton, Inactivación de *E. coli*, Contaminación hídrica.

ESTUDIO DE REMOCIÓN DE NÍQUEL (II) CON ZEOLITA NATURAL CUBANA EN MODO DINÁMICO

Cynthia de la Caridad Oliva Marín¹, Yusleydi Enamorado Horrutiner¹, José Alejandro Ricardo García¹, Regina de Lahaye Torres², Inocente Rodríguez Iznaga²

¹Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ²Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: colivamarin@gmail.com

RESUMEN:

El níquel es un elemento que se encuentra de forma natural en los suelos cubanos, y puede llegar fácilmente al agua de consumo humano. Su control y monitoreo es de vital importancia por las afecciones que causa a la salud, incluso a muy bajas concentraciones. Técnicas accesibles en los laboratorios de análisis como, espectroscopía ultravioleta-visible (UV-vis) y espectrometría de absorción atómica (EAA) con llama, no poseen límites de detección suficientes para detectar la concentración máxima admisible de Ni establecida en la Norma Cubana 827 (NC-827) para agua potable. Por ello es necesario preconcentrar el analito antes de la determinación final. Una zeolita natural tipo clinoptilolita-mordenita del yacimiento San Andrés, se empleó como sorbente en este trabajo, previo a la determinación instrumental del analito. Para el análisis de capacidad de sorción, se evaluaron los siguientes parámetros: pH, caudal y volumen de ruptura. Los ensayos de sorción se realizaron en flujo, y la determinación final del analito se realizó por UV-Vis, mediante el método de la Dimetilglioxima. Las condiciones óptimas fueron pH 5, caudal $2 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ y volumen de ruptura 110 mL. También se realizaron ensayos de desorción con disoluciones de EDTA ($0.1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$) y NH_4Cl ($2 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$); para este último se obtuvo una recuperación cuantitativa, mayor al 90 por ciento. Posteriormente se evaluaron los ciclos sorción-desorción y se hizo un ensayo de preconcentración al valor de concentración límite establecido en NC-827. Un estudio del proceso de intercambio entre los iones Ni^{2+} y los cationes de compensación de la zeolita fue llevado a cabo para evaluar los sitios preferenciales del analito en el mineral.

Palabras clave: *Zeolita natural, Níquel, Sorción en flujo.*

OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LA BIOMASA INMOVILIZADA EN ZEOLITA CUBANA DE SAN ANDRÉS, PARA LA REMOCIÓN DE Pt(II)

Laura Carmona Fernández¹, Rachel Lombana Fraguela¹, Regina La Haye Torres¹, Mario S. Pomares Alfonso¹, María Isabel Sánchez López², Margarita E. Villanueva Tagle³

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Facultad de Biología, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: laucarfer1999@gmail.com

RESUMEN:

Los contaminantes farmacéuticos persistentes, como los citostáticos de Pt(II), de uso común en la terapia del cáncer, han sido detectados en cuerpos de agua, a bajas concentraciones. Los tratamientos electroquímicos, fotoquímicos y biológicos para la remoción o degradación de estos contaminantes son costosos y a veces ineficientes. La extracción en fase sólida es una alternativa viable. El objetivo del presente estudio fue obtener y caracterizar la biomasa inactiva de *Aspergillus niger* O-5 inmovilizada en una zeolita natural tipo clinoptilolita-mordenita del yacimiento San Andrés, como sorbente para la remoción de Pt(II) de aguas. El material sorbente (Bio-NZ) se preparó a partir de dos metodologías: biomodificación e inmovilización. La disolución modelo de Pt(II) se preparó a partir de la sal de potasio del tetracloruroplatino(II). El complejo se cuantificó mediante la espectrometría de absorción molecular ultravioleta-visible (UV-vis). El material sorbente se caracterizó mediante: microscopía electrónica de barrido, espectroscopía infrarroja (IR), difracción de rayos X, y pH del punto de carga cero. Las micrografías obtenidas, indican el crecimiento de la biomasa de *Aspergillus niger* O-5 en la superficie de la zeolita. Por otra parte, la espectroscopía IR, mostró los principales patrones de vibración característicos de ambos materiales. Se estudió la influencia del pH [2-9] en el porcentaje de retención de los materiales preparados con ambos métodos bajo las siguientes condiciones experimentales: masa de Bio-NZ: 10 mg, V[PtCl₄]²⁻: 10 mL, concentración: 10 mg·L⁻¹ y tiempo: 30 min con velocidad de agitación de 105 rpm. Para el método de biomodificación, la retención oscila entre 60 y 52% en el intervalo de pH estudiado.

Palabras clave: Bio-NZ, Inmovilización, [PtCl₄]²⁻, Remoción, Modo estático.

BENTONITAS CUBANAS MODIFICADAS: CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y MICROBIOLÓGICA

Diana Rosa Osorio Enriquez^{1,2}, Dayaris Hernández Oliva¹, Juan Jiménez Chacón³, Vivian Montero Alejo⁴, Aramis Rivera Denis^{1*}

¹ Laboratorio de Ingeniería de Zeolitas, Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Laboratorio Universitario de Caracterización y Estructura de la Sustancia (LUCES), Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

⁴ Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Centro de Investigación y Desarrollo de Medicamentos, La Habana, Cuba.

E-mail: dianarosaosorioe@gmail.com

RESUMEN:

La arcilla cubana bentonita (Bent) está compuesta fundamentalmente por montmorillonita como fase mineral principal. Propiedades como el hinchamiento, la adsorción e intercalación de especies químicas, junto a su capacidad de intercambio catiónico (IC), constituyen la base de su empleo como soporte de fármacos, fase reforzante en nanocompuestos y en la eliminación de contaminantes. La incorporación de propiedades antimicrobianas, permite su uso como aditivo especial, ampliando su alcance en aplicaciones cosméticas y biomédicas. El presente trabajo estudió los procesos de IC en la Bent natural y modificada, mediante el empleo de la fluorescencia de rayos X (FRX), y su influencia en la actividad antibacteriana de las muestras. Los materiales homoiónicos Cu-Bent se obtuvieron a partir de la Bent natural sin modificar y sometida a tratamientos químicos ácidos (HCl 0.1 y 1 mol/L) y con NaCl 0.2 mol/L. La caracterización de los sólidos se realizó mediante difracción de rayos X (DRX) y FRX, mientras que los líquidos sobrenadantes se analizaron por FRX y espectroscopía ultravioleta-visible (UV-Vis) a 810 nm. La actividad antibacteriana se evaluó por el método de conteo de colonias empleando *Staphylococcus aureus* y *Echerichia coli*. Los espectros de FRX corroboraron la efectividad del IC en las muestras tratadas con cobre. En los patrones de DRX no se visualizaron variaciones significativas en el plano de reflexión basal 001. Sin embargo, se observaron nuevas señales asociadas a la presencia de cobre. Los ensayos microbiológicos revelaron que las muestras tratadas con ácido, y modificadas con cobre, presentan actividad frente a ambos tipos de bacterias.

Palabras clave: *Bentonita, Intercambio catiónico, FRX, Propiedades bactericidas.*

EVALUACIÓN DE ELECTRODOS IMPRESOS MODIFICADOS CON NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE ZINC EN LA CUANTIFICACIÓN DEL COLESTEROL LIBRE

Fernando Bordallo León¹, Yasser Matos Peralta¹, Milenen Hernández Marín², José Moran-Mirabal³, Eduardo González-Martínez³, Antonio Merchor Rodríguez², Idalmelis del Castillo Puentes², Marcello Mascini⁴, Alicia M. Díaz García¹

¹ Laboratorio Bioinorgánica, Departamento de Química General e Inorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Inmunoensayo, Planta de Producción de Biosensores, La Habana, Cuba. ³ Department of Chemistry and Chemical Biology, McMaster University, Canada. ⁴ Faculty of Bioscience and Technology for Food, Agriculture and Environment, University of Teramo, Italia.

E-mail: adg@fq.uh.cu, adg1959@gmail.com

RESUMEN:

El colesterol es un lípido esencial presente en las membranas celulares de los animales. Su elevada acumulación en sangre provoca enfermedades cardiovasculares. En el presente trabajo se planteó el estudio de las potencialidades de electrodos impresos (SPE, de sus siglas en inglés Screen-printed electrodes) en la cuantificación de esta biomolécula. Los electrodos se modificaron con nanoestructuras de ZnO y la enzima colesterol oxidasa se utilizó como elemento de biorreconocimiento. Las ZnONPs se sintetizaron mediante precipitación química y posterior calcinación controlada. La caracterización estructural y morfológica de las NPs se realizó mediante UV-Vis, FTIR, DRX y TEM. Se observó un máximo de absorción bien definido en los espectros UV-Vis para suspensiones de las ZnONPs alrededor de 370 nm; mientras que los FTIR mostraron la vibración de valencia Zn-O con una frecuencia cercana a 500 cm⁻¹. Los difractogramas confirmaron la cristalinidad de los materiales sintetizados, siendo la Wurtzita la fase predominante. Por TEM se confirmó la formación de nanoesferas de tamaños de alrededor de 60 nm, las que se agruparon formando estructuras interconectadas. Las ZnONPs y la enzima colesterol oxidasa se depositaron sobre la superficie de los SPE mediante un procedimiento capa a capa, y se siguió cada paso de modificación por AFM. Los SPE modificados mostraron una respuesta electroquímica rápida y reproducible hacia la presencia de colesterol. Además, la respuesta se evaluó en presencia y ausencia de mediador electroactivo ([Fe(CN)₆]³⁻⁴⁻). Los parámetros de desempeño (LOD, sensibilidad, intervalo lineal) demuestran la competitividad de los nuevos sensores en comparación a los previamente informados. Finalmente, los bioelectrodos mostraron una adecuada tolerancia a la presencia de potenciales interferentes (ácido úrico, paracetamol, glucosa y ácido ascórbico) presentes en disolución.

Palabras clave: ZnO nanoparticles, Biosensor, SPE.

PAST, PRESENT AND PERSPECTIVES OF THE USE AND DEVELOPMENT OF ION AND ELECTRON ACCELERATORS BASED ANALYTICAL METHODS FOR MATERIALS CHARACTERIZATION AT THE UNIVERSITY OF HAVANA

Edwin Pedrero González¹, Oscar Díaz Rizo², Mario Pomares Alfonso¹, Saúl Larramendi Valdés^{1,3}, Maikel Díaz Castro²

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: edwin.pedrero@imre.uh.cu

RESUMEN:

Se exponen antecedentes, el estado actual y perspectivas del empleo y desarrollo de métodos analíticos con aceleradores de iones, para el estudio de materiales funcionales y naturales en la Universidad de La Habana (UH). Los principales materiales analizados han sido semiconductores nanoestructurados, cerámicos, zeolíticos y muestras ambientales. Los métodos utilizados han sido: 1) desde 1996, Análisis con Haz de Iones (IBA) en aceleradores de cinco universidades [Nacional Autónoma de México (UNAM), de Sao Paulo (USP), Católica de Río de Janeiro (PUC-RJ), Federal de Río Grande del Sur (UFRGS), Autónoma de Madrid (UAM)] y desde 2021 en el Instituto Unificado de Investigaciones Nucleares (JINR) de Dubna, Rusia; 2) desde 2003, Análisis por Activación Gamma (GAA) con un acelerador de electrones en el JINR; 3) desde 2011, Espectrometría de Masa con Aceleradores (AMS) en la Universidad Federal Fluminense de Río de Janeiro (UFF-RJ) y desde 2021 en la UNAM. Los principales resultados obtenidos están recogidos en más de 30 artículos publicados desde el año 2000; la mayoría de ellos con apoyo de más de una decena de proyectos Cuba-Brasil (CLAF, CAPES y CNPq), que garantizaron movilidad y tributaron a tesis de licenciatura, maestría y doctorado de jóvenes cubanos. En 2021 comenzó una intensa colaboración UH-JINR en IBA con el Sector de Materiales Físico-Nucleares y Nanotecnología con Implantación Iónica del JINR. Se han firmado acuerdos específicos de cooperación UH-JINR. En 2024 se identificaron intereses de colaboración UH-JINR-UNAM con el Laboratorio de Espectrometría de Masa con Aceleradores (LEMA) de la UNAM.

Palabras clave: *Caracterización de materiales, Análisis de muestras del medioambiente, Análisis químico, Análisis nuclear.*

CLASIFICACIÓN DE MUESTRAS DE TABACO MEDIANTE ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES, ANÁLISIS DISCRIMINANTE LINEAL Y FLUORESCENCIA DE RAYOS X

Melissa de la C. Sardiñas Castillo¹, Juan Jiménez Chacón², Vanessa Martín Abreu³, Isabel Márquez Leiva³, Regina De la Haye², Mirella Peña Icart²

¹ Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Instituto de Investigaciones del Tabaco, San Antonio de los Baños, Artemisa, Cuba.

E-mail: melissasardinacastillo@gmail.com

RESUMEN:

El tabaco cubano es reconocido por su calidad a nivel internacional teniendo un alto prestigio. En la actualidad es el cuarto renglón de exportación de Cuba, de ahí que se hace necesario un estudio que permita conocer su concentración química y así evitar falsificaciones. En este trabajo se preparan 21 muestras que servirán como patrones para desarrollar un procedimiento para la cuantificación de metales (Mg, Ca, Cu, Zn, Mn, Fe, Sr, Al, B, Ba, Na, K, Li y Ti) por fluorescencia de rayos X. Con este objetivo se realizó la determinación por Espectrometría de Emisión con Plasma Acoplado por Inducción. Se establecieron los principales parámetros de desempeño, los cuales resultan adecuados para su propósito. Para estimar la concentración final se tuvo en cuenta el factor de humedad que estuvo entre 1.085 y 1.221 %. Se aplicó Análisis de Componentes Principales en las muestras. Como resultado, se observó una clara definición de las muestras clasificadas por su fortaleza. También, se proyectaron sobre el gráfico de puntuaciones obtenido por la matriz de intensidades, tres muestras de producto terminado internacionales y una de consumo nacional, separando las de origen cubano de las mismas de manera eficiente. Se realizó un Análisis Discriminante Lineal el cual confirmó la información de las muestras, así como los resultados obtenidos por el ACP. Se demostró la alta potencialidad para clasificar las muestras de según su fortaleza y de acuerdo con el tipo de muestra estudiada dándole un valor agregado al mismo para su comercialización en el mercado internacional.

Palabras clave: *Materia prima, Tabaco, Análisis de componentes principales, Clasificación y análisis discriminante lineal.*

PARTICULARIDADES DEL ANÁLISIS ELEMENTAL DE RON MEDIANTE ESPECTROSCOPIA DE EMISIÓN Y ABSORCIÓN ATÓMICA

Rosmery del Carmen Remón Ferriol¹, Gabriela López-Gavilán Borroto², Sheila Alleyne Veitía², Odalys Collazo García², Mario Simeón Pomares Alfonso²

¹ Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: rosmeryremonferriol0@gmail.com

RESUMEN:

Mantener e incrementar la calidad del ron cubano es un objetivo estratégico de importancia económica. La composición elemental puede influir en las propiedades organolépticas, representar riesgo para la salud y/o contribuir a su certificación de origen. Concentraciones del orden de $\mu\text{ L}^{-1}$ constituyen un reto para su determinación confiable. El objetivo de este trabajo fue desarrollar un procedimiento de preconcentración de muestra para posterior análisis elemental mediante la Espectroscopia Óptica de Emisión con Plasma Inductivamente Acoplado (ICPOES) y la Absorción Atómica con Llama (FAAS). Se seleccionaron muestras en diferentes botellas del mismo tipo de ron y lote; y soluciones hidroalcohólicas al 40% de dos tipos de alcohol. Se empleó el Espectrómetro ICPOES Horiba Scientific Última 2 y el Espectrómetro de Absorción Atómica modelo PU 9100. Se estudió la combinación de la evaporación y posterior digestión con HNO_3 y H_2O_2 , y diferentes factores de concentración. En las soluciones hidroalcohólicas se determinó: a) por EAAL: Pb ($0,22\text{ mg L}^{-1}$), Fe ($0,76\text{ mg L}^{-1}$) y Zn ($0,036\text{ mg L}^{-1}$) con precisión entre 7 y más del 20%; Cd y Cu menor al límite de detección b) por ICPOES: Zn, Fe, Mg, Ca, Cu, Na y K. La concentración osciló entre $0,023\text{ mg L}^{-1}$ y $10,9\text{ mg L}^{-1}$ para Zn y Na; Pb, Ni y Cr se encuentran por debajo del límite de detección. Se evaluó la veracidad por ICPOES para Cu, Fe y Zn en solución hidroalcohólica, comparando con concentraciones reportadas por otro laboratorio. Se estudian otras opciones de preconcentración para incrementar límites de detección.

Palabras clave: Ron, Preconcentración, Composición elemental, Límites de detección, Precisión.

Carteles

ESTABILIDAD ESTRUCTURAL DE MATERIALES ZEOLÍTICOS CON Ni-Co COMO CATALIZADORES DE BAJO COSTO PARA HIDROGENACIÓN SELECTIVA DE CITRAL

Arbelio Pentón Madrigal¹, Inocente Rodríguez Iznaga², Beatriz Concepción Rosabal², Yailen Costa Marrero³, Tania Farías Piñeira², Céline Fontaine⁴, Lexane Paget⁴, Vitalii Petranovskii⁵, Gwendoline Lafaye⁴

¹ Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Universidad de las Ciencias Informáticas, La Habana, Cuba. ⁴ Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers (IC2MP), UMR 7285 CNRS, Université de Poitiers, Poitiers, France. ⁵ Centro de Nanociencia y Nanotecnología (CNyN), Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Ensenada, B.C., México.

E-mail: arbelio@fisica.uh.cu

RESUMEN:

Se sintetizaron materiales zeolíticos con sistemas mono- y bi-metálicos de Co^{2+} y Ni^{2+} mediante la modificación de zeolita natural con disoluciones de cloruros de estos metales, usando dos métodos de preparación: intercambio iónico tradicional (IE) e impregnación (Imp). Los materiales fueron estudiados por difracción de rayos X (DRX) *in situ* en atmosfera de hidrógeno y en función de la temperatura y complementados con otras técnicas de caracterización. Se particularizó en la evaluación de la estabilidad estructural de estos sistemas soportados en las fases zeolíticas (una mezcla de clinoptilolita-heulandita y mordenita) y la influencia mutua de las especies de ambos metales. Los materiales preparados por Imp poseen mayores contenidos de níquel y cobalto; sin embargo, también contienen cantidades significativas de cloruro. En contraste, los materiales preparados por IE mostraron un contenido insignificante de cloruro y mayores áreas superficiales específicas. Los experimentos de difracción de rayos X *in situ* no revelaron deterioro de las estructuras zeolíticas, aun a altas temperaturas. Se observaron cambios significativos en la intensidad de ciertos máximos de difracción, atribuidos a la naturaleza, cantidad y posición de los cationes extra-enrejado zeolítico, así como a las especies reducidas de estos metales. Estos sistemas son de interés catalítico en la hidrogenación selectiva de citral para alcoholes insaturados usados en la producción de productos químicos valiosos, fragancias, etc, donde tradicionalmente se emplean catalizadores costosos de metales nobles. Entre todos estos materiales de bajo costo aquí preparados, el bimetálico NiCo sintetizado por IE resultó ser el catalizador más prometedor.

Palabras clave: Zeolita, Difracción de rayos X (DRX), Estructura cristalina, Intercambio iónico, Bimetálico Ni – Co.

CATALIZADORES ZEOLÍTICOS PARA LA DEGRADACIÓN DE COLORANTES EN AGUA MEDIANTE UN PROCESO FOTO-FENTON CON LUZ VISIBLE

Orlando Alvarez Landa¹, Katia Borrego Morales², Omitzu Picazo Mozo², A. Rabdel Ruiz-Salvador³, Menta Ballesteros⁴, Tania Farías²

¹ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Universidad Pablo de Olavide, Sevilla, España. ⁴ Departamento de Biología Molecular e Ingeniería Bioquímica, Universidad Pablo de Olavide, Sevilla, España.

E-mail: orly.al@icloud.com; fariascu@gmail.com

RESUMEN:

El agua es fundamental para la vida, pero la industrialización y el crecimiento poblacional han intensificado la explotación de los recursos hídricos y su contaminación. Entre los contaminantes orgánicos los colorantes son especialmente preocupantes debido a su impacto en los ecosistemas. Los procesos de oxidación avanzada, como los foto-Fenton, destacan por su eficacia en la mineralización de contaminantes recalcitrantes, particularmente al emplear catalizadores heterogéneos. Las zeolitas son buenas candidatas como catalizadores foto-Fenton por sus propiedades de intercambio iónico y adsorción. Además, presentan una alta estabilidad y se pueden reutilizar, reduciendo costos y minimizando residuos. En este trabajo se desarrollaron zeolitas modificadas con hierro (NZ-Fe) y cobre (NZ-Cu), y una muestra bimetálica (NZ-Fe-Cu), y se evaluaron como catalizadores foto-Fenton. Los materiales se caracterizaron mediante DRX, FTIR, SEM/EDS y UV-vis. Los ensayos foto-Fenton se realizaron a temperatura ambiente, utilizando rodamina-B como colorante modelo (10 ppm), H₂O₂ (100 ppm), diferentes relaciones catalizador/disolución (25, 50, 75 y 100 mg/100 mL) y luz visible de 6W. Todos los materiales lograron degradar el colorante, mostrando su eficacia como catalizadores foto-Fenton. La muestra bimetálica destacó con un 86% de degradación en tres horas y una cinética inicial más rápida que las monometálicas, evidenciando un efecto sinérgico por la combinación de ambos metales. La mejor relación catalizador/disolución fue de 50 mg/100 mL; cantidades mayores disminuyeron el porcentaje de degradación debido al apantallamiento y dispersión de la luz por las partículas suspendidas. Estos resultados destacan el potencial de los catalizadores desarrollados en el tratamiento de aguas coloreadas.

Palabras clave: *Clinoptilolita natural, Catalizadores heterogéneos, Procesos foto-Fenton, Contaminación de aguas, Colorantes.*

EVALUACIÓN DE LA HALLOYSITA COMERCIAL Y UNA ZEOLITA DERIVADA DE LA HALLOYSITA PARA LA SEPARACIÓN DE PROPANO/PROPILENO Y CAPTURA DE CO₂

David Sarrión Torres¹, Giselle I. Autié Castro², Tania Farías², Daniel Ballesteros Plata¹, Enrique Rodríguez Castellón¹, Juan A. Cecilia¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, Málaga, España. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: giselleautie@gmail.com

RESUMEN:

Las arcillas son adsorbentes de bajo costo con gran potencial gracias a su alta superficie específica y capacidad de intercambio iónico. La halloysita es una arcilla del grupo del caolín con una capa de una sola lámina tetraédrica y una sola lámina octaédrica. En el presente trabajo se obtiene una zeolita por el método hidrotermal, empleando la metahalloysita como fuente de silicio y aluminio, esta última obtenida por deshidratación de la halloysita. Los materiales se evaluaron según su capacidad de separación de la mezcla propano/propileno y de captura de CO₂. Se emplearon las técnicas de caracterización: DRX, FTIR, XPS, MEB y adsorción de CO₂ a 273 K. La halloysita y la zeolita exhibieron buena resolución de los picos en el cromatograma obtenido, así como tiempos de elución cortos (5 min). Las interacciones huésped-hospedero traducidas en los valores calculados de Q_d , mostraron ser mayores en el material zeolítico debido a la presencia de microporos y una mayor área superficial. Los valores del factor de separación (α) mostraron la capacidad de ambos materiales para resolver los componentes de la mezcla. La muestra de metahalloysita no fue capaz de separar la mezcla evaluada debido al colapso de la estructura como resultado del tratamiento térmico. La zeolita mostró la mejor capacidad de adsorción de CO₂, lo que concuerda con las propiedades texturales obtenidas. A partir del patrón XRD registrado y los espectros XPS, se obtuvo una buena cristalinidad en la muestra de zeolita y relaciones Si/Al > 1 en todas las muestras respectivamente.

Palabras clave: *Halloysita, Zeolita, Separación propano/propileno, Captura de CO₂, Cromatografía Gaseosa Inversa.*

ZEOLITAS SINTÉTICAS OBTENIDAS A PARTIR DE CENIZAS DE CÁSCARA DE ARROZ Y SU EVALUACIÓN EN LA REMOCIÓN DE IONES COBRE

Lorena Alvarez Ruiz¹, Katia Borrego-Morales², Tania Farías²

¹ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: lorena030123@gmail.com; fariascu@gmail.com

RESUMEN:

La escasez de agua es uno de los mayores problemas a los que se enfrenta la humanidad. Los cambios climáticos y el deterioro de los cuerpos de agua se encuentran entre las principales causas de esta problemática. Entre los contaminantes del agua se encuentran los metales pesados, que provienen de diversas actividades antropogénicas, principalmente de tipo industrial. Las cenizas de cáscara de arroz (CCA) son un residuo agrícola de gran volumen y su inadecuada deposición puede contaminar el medioambiente. Estas cenizas tienen un alto contenido de silicio y pueden ser empleadas en la síntesis de zeolitas, lo que conlleva a su valorización. Las zeolitas son materiales microporosos con una estructura tridimensional que les confiere propiedades como adsorbentes, intercambiadores iónicos y catalizadores, por lo que se han empleado en diferentes aplicaciones medioambientales. En este trabajo se sintetizaron zeolitas a partir de dos CCA industriales (tecnologías de gasificación y horno dual) y una CCA obtenida en el laboratorio. Los resultados obtenidos por DRX y FTIR ratifican que es posible sintetizar zeolitas tipo LTA a temperaturas moderadas, tiempos cortos de cristalización y buena pureza a partir de las CCA en lugar de reactivos químicos. A partir de las CCA de laboratorio y de gasificador se obtienen zeolitas con mayor cristalinidad, lo que se debe a su composición química. Se confirmó el potencial de las zeolitas obtenidas en la remoción de Cu^{2+} , con una cinética rápida a temperatura ambiente ($t_{\text{eq}} = 35$ min). Los resultados obtenidos revisten un doble impacto para el medio ambiente: la valorización de un residuo y la descontaminación de aguas.

Palabras clave: *Síntesis de zeolitas, Valorización de residuos, Cenizas de cáscara de arroz, Remoción de metales pesados.*

CARACTERIZACIÓN DE *THALASSIA TESTUDINUM* COMO SORBENTE EN LA EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA DE Cu(II)

Harold Fernández González¹, Juan Jesús Piña Leyte Vidal¹, Margarita E. Villanueva Tagle¹, Odalys L. Collazo García², Sheyla Alleyne Veitía², Regina de La Haya Torres², Mario S. Pomares Alfonso²

¹ Facultad de Química, Universidad de la Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: haroldfg35@gmail.com

RESUMEN:

Los biosorbentes han tenido gran aceptación en la extracción en fase sólida de metales pesados para la remediación de aguas o preconcentración con fines analíticos. En el ecosistema marino al sur de la Península de Guanahacabibes, reserva de la biosfera, se cuenta con pastos marinos de la especie *Thalassia testudinum* de conocida capacidad de bioacumulación de metales. El objetivo del presente estudio fue caracterizar la especie *Thalassia testudinum* como biosorbente para la extracción en fase sólida de Cu(II) en disolución acuosa y evaluar su posible empleo con fines de remediación o analíticos. En la caracterización, la espectroscopia infrarroja demostró la presencia de grupos funcionales de esta biomasa que participan en los posibles mecanismos de sorción. Se estudió la influencia del tiempo de contacto en el intervalo 3-90 minutos, y se aplicaron modelos cinéticos de pseudo primero y segundo orden. Además, se determinó la mejor relación entre la masa de sorbente y el volumen de disolución, así como la influencia de la concentración inicial del Cu(II). El proceso de sorción de Cu(II) en la *Thalassia* se estudió en el equilibrio a varias temperaturas, y las isotermas resultantes se ajustaron a diversos modelos matemáticos. Se demuestran las potencialidades de la *Thalassia testudinum* como biosorbente, así como las mejores condiciones experimentales para la extracción de Cu(II) en aguas.

Palabras clave: *Thalassia Testudinum*, Remediación, Cu(II), Extracción en fase sólida.

ESTUDIO PRELIMINAR DE UN POLÍMERO DE IMPRESIÓN MOLECULAR TIPO ACRÍLICO COMO RECEPTOR DE FÁRMACOS

**Yenisleidy Valdés Arencibia^{1,2}, Markel Denet Luaces Alberto^{1,2}, Oralís Alburquerque Brooks³,
Ana Rosa Lazo Fraga²**

¹ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Instituto de Ciencias del Mar (ICIMAR), La Habana, Cuba.

E-mail: yeni.k.arencibia@gmail.com

RESUMEN:

El vertimiento excesivo y descontrolado de los antibióticos ha provocado un alarmante incremento de la resistencia a la acción antimicrobiana de las bacterias; por lo que, el control del contenido de estos en muestras ambientales resulta de gran importancia. Los polímeros de impresión molecular son materiales sintéticos con nanocavidades espaciales y funcionalmente preparadas para el reconocimiento molecular. Estos materiales resultan muy atractivos para la construcción, tanto de sistemas de separación como fases sensoras. En el presente trabajo se sintetizaron dos polímeros de impresión molecular tipo acrílico, empleando como molécula plantilla la Eritromicina. Para ello, se utilizó ácido metacrílico como monómero funcional, etilenglicol dimetacrilato como entrecruzador, y peróxido de benzoílo como iniciador, variando las proporciones de los mismos. El rendimiento de la polimerización fue entre un 71 y 75 %. La Microscopía Electrónica de Barrido mostró que los polímeros sintetizados tienen partículas muy dispersas en cuanto a tamaño y forma, además de una superficie rugosa. La Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier confirmó que en su composición está mayoritariamente el entrecruzador y que no hay diferencias entre los dos polímeros obtenidos. Por último, se realizó la caracterización analítica de los polímeros, para lo cual fue necesario el ajuste de un método espectrofotométrico para la determinación de este fármaco en agua. Los estudios de reenlace permitieron observar una tendencia ascendente tanto de la capacidad estática como del porcentaje de retención, con el aumento de la concentración inicial del analito.

Palabras clave: *Polímeros de impresión molecular, Acrílico, Eritromicina.*

CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDOS Y DEPÓSITOS EN ENSAYOS ACELERADOS A PARTIR DE CENIZAS SIMULADAS

Abel Rivas Gutierrez¹, Beatriz Concepción Rosabal¹, Carlos Lariot Sánchez¹, Bulat Bakirov²

¹ Laboratorio de Análisis Estructural, División LUCES, Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Rusia.

E-mail: abelrg1995@gmail.com

RESUMEN:

Para incrementar el porcentaje de residuos agrícolas cañeros que se utiliza en mezcla con bagazo, con el fin de generar energía eléctrica en calderas de biomasa, es necesario estudiar la corrosión que causa en los tubos del sobrecalentador debido a su alto contenido en álcalis y cloruros en comparación con el bagazo. Para ello se desarrolla un ensayo acelerado de 3 días, tentativo para pronosticar a escala de laboratorio el comportamiento, ante la corrosión en zonas de alta temperatura, de aceros tipo usados en el sobrecalentador de generadores de vapor de altos parámetros. Para caracterizar este proceso se realizó el cálculo de velocidad de corrosión, análisis en la interfase acero/óxidos/depósitos y análisis químico elemental y composicional de los aceros y depósitos obtenidos. En ambos aceros estudiados se observó un incremento en la velocidad de corrosión para la composición de cenizas sintéticas de composición similar a la de mayor concentración de residuos de la agricultura de la caña. Igualmente se observó un mayor grosor de las capas de óxidos al tratar los aceros con cenizas sintéticas de composición similar al de mayor porcentaje de residuos en mezcla con bagazo. El estudio realizado permitió determinar comparativamente el comportamiento en las primeras etapas de la corrosión a 540 °C de dos aceros empleados en la construcción de sobrecalentadores de calderas de altos parámetros atacados por cenizas que simularon las que se forman al combustionar diferentes concentraciones de residuos agrícolas cañeros en mezcla con bagazo.

Palabras clave: *Acero, Biomasa, Cenizas, Corrosión, Sobrecalentador.*

SEM CHARACTERIZATION OF CONCRETES WITH BLAST FURNACE SLAG OF THE CUBAN STEEL INDUSTRY

Carlos Lariot Sánchez¹, Iatny de la Roz Martínez², Beatriz Concepción Rosabal¹, Nicolás Sirgado Pérez¹, Abel Rivas Gutierrez¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Escuela Interarmas de las FAR “General Antonio Maceo” (EIGAM), Artemisa, Cuba.

E-mail: lariot@imre.uh.cu

ABSTRACT:

Replacing aggregates in concrete with recycled or waste materials is a common practice to enhance properties as durability, impermeability, and workability. Blast furnace slag, an undesirable waste product of the steel industry, is often used for this purpose. The primary objective of this study is to investigate the formation of cracks during curing at the transition zones between cement paste and slag, given their adverse effects on concrete properties. Microstructural fractographic analysis with scanning electron microscope provides valuable insights into material properties and defects. Our study was focused on the interface cement paste-slag as it represents the weakest phase that limit the concrete strength. Samples with varying quantity of aggregate replacement by slag were characterized using backscattered electrons. Better than secondary electrons, backscattered electrons highlight surface imperfections on both polished concrete's flat surfaces and the irregular surfaces of fractured material. All concrete specimens exhibited a good internal structure with adequate density of the cementitious matrix and well-bonded cement paste-slag interfaces. In the first 28 days of curing, only isolated empty microcracks appeared in the cement paste, initially occupied by traces of hydration liquid pumped during sample preparation. These microcracks are expected to be filled later by hydrated products during concrete aging, contributing to improved strength and durability. Optical transmission microscopy analysis of thin sections of concrete with slag substitution revealed the dense and compact structure of the concrete. The microscopic approach adopted in this work provides a valuable contribution to the study.

Keywords: *Blast furnace slag, Concrete, Petrography, Optical Microscope, Scanning Electron Microscopy.*

ESPECTROSCOPIA FTIR COMO HERRAMIENTA EN EL CONTROL DE CALIDAD DE LOS PRODUCTOS ZEOLÍTICOS NEREA®

Esperanza Yamile de la Nuez Pantoja¹, Aliwí Zaragoza Díaz¹, Julio Cesar Molina Amat¹, Odalys Collazo García², Inocente Rodríguez Iznaga¹, Gerardo Rodríguez Fuentes¹

¹ Grupo NatZEng – Laboratorio de Ingeniería de Zeolitas Naturales, Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² División LUCES, Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: ydelanue@imre.uh.cu

RESUMEN:

La calidad define la capacidad de un bien o servicio (o producto) para satisfacer diferentes necesidades expresas o implícitas. Es por ello que, a cualquier proceso productivo, se atribuye que el control de la calidad es una etapa imprescindible para garantizar un producto adecuado. El proceso productivo de los productos zeolíticos NEREA® Sustrato, NEREA® Fertilizante y NEREA® Plus, producidos y comercializados en el país para uso agrícola, establece llevar a cabo un control estricto sobre los parámetros de calidad pH y conductividad eléctrica, expresada en sólidos disueltos totales (SDT). Estos parámetros permiten validar que han ocurrido los procesos de adsorción e Intercambio iónico, evidenciando que el proceso productivo se ha desarrollado correctamente. Este trabajo particulariza en el uso de la Espectroscopia FTIR como herramienta en el control de calidad de estos productos, articulado con los requerimientos de pH y SDT ya establecidos. Para este fin, los productos NEREA® fueron obtenidos bajo diferentes condiciones, usando como materia prima zeolítica el mineral del yacimiento Tasajeras. Los estudios por FTIR mostraron diferencias entre los productos en función del procedimiento de obtención, aplicado tanto de forma satisfactoria e inadecuada. En correspondencia con esto, los espectros evidenciaron la presencia de las bandas características de iones fosfato, amonio y urea con claras diferencias en su posición e intensidad, como una medida del nivel de calidad de estos productos. Estas diferencias fueron corroboradas por los valores obtenidos de pH y SDT, establecidos como parámetros en el control de calidad de estos y su proceso productivo.

Palabras clave: Zeolita natural, Productos NEREA®, Proceso productivo, Control de calidad, FTIR.

ESTUDIO DE MATERIALES QUE COMPONEN EL MORTERO DE LA FUENTE DE LA SAMARITANA

Ivette Ravelo Cabrera¹, Odalys Lupe Collazo García¹, Juan Jiménez Chacón¹, Alexis Martín Rodríguez², Karla Betancourt Rodríguez¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Universidad de las Artes (ISA), La Habana, Cuba.

E-mail: ivette@imre.uh.cu

RESUMEN:

La fuente de “La Samaritana” es, en estos momentos (ver Fig. 1), la fuente más antigua que se conserva en Cuba (siglo XVIII). Está ubicada en el patio del otrora Convento de Santa Clara de Asís, sito en el casco histórico de la ciudad de La Habana. Se estima que el revoco que cubre la obra está elaborado a partir de una mezcla de cal, arena sílice y chamota. Este mortero se utilizaba en España desde la época romana para construcciones hidráulicas, debido a su impermeabilidad. Se hizo necesario comprobar la composición del estuco (ver Fig. 2) y del revoco, para reconstruir y sustituir faltantes de mortero original en la fuente. Para el reconocimiento de la superficie se usó un microscopio USB digital con el que se pudo observar partes de pinturas que la recubrieron y dos capas de mortero color rosa característico de la mezcla impermeable. Se extrajeron 4 muestras, las cuales fueron divididas en partes. Una parte fue utilizada para los análisis gravimétricos del mortero, la otra fue incluida en una resina para su estudio estratigráfico.



Fig. 1. Estado actual de la fuente de “La Samaritana”.



Fig. 2. Detalle del estuco.

Palabras clave: Mortero de cal, Estratigrafía, Patrimonio cultural, Arqueometría, Azul maya.

IDENTIFICACIÓN DE PIGMENTOS DE OBRAS PATRIMONIALES MEDIANTE FLUORESCENCIA DE RAYOS X

Camila Laza López, Ivette Ravelo Cabrera, Juan Jiménez Chacón, Nicolás Sirgado Pérez

Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: claza9002@gmail.com

RESUMEN:

El presente trabajo se basa en una investigación dirigida a la identificación de elementos mayoritarios en pigmentos muestreados de obras cubanas: pinturas al óleo retrato de Hombre y Mujer ubicado en la casa de los Condes de Jaruco y Santa Cruz, Casco Histórico de la Habana Vieja, La Habana y una pintura mural al fresco de Wilfredo Lam ubicación edificación pública en el Vedado, La Habana. Para dicha identificación fue utilizada la técnica de espectroscopia de Fluorescencia de Rayos X por Energía Dispersiva. Donde los pigmentos fueron analizados haciendo uso de un espectrómetro X Supreme 8000 (Oxford Instrument) equipado con un detector semiconductor de Si tipo SDD y un ánodo de Wolframio como emisor. Los elementos identificados en las pinturas al óleo fueron: Pb, Ca, Ba, S, Fe, Zn, Mn, Cr, Co, Ti y en la pintura mural al fresco se registraron: Ca, S, Fe, Cr, Mg, Al, Cl, Ti, Mn, Ni, Al, K, Co, coincidiendo efectivamente con elementos destinados a la preparación de pigmentos utilizado en las dos obras pictóricas estudiadas. Posteriormente, esta investigación quedará a disposición de las instituciones encargadas de las restauraciones pertinentes de cada obra, labor imprescindible para el mantenimiento de nuestro patrimonio cultural.

Palabras clave: Pigmentos, Fresco, Óleo, Wilfredo Lam, Fluorescencia de rayos X.

TAMIZAJE QUÍMICO E IDENTIFICACIÓN DE METABOLITOS SECUNDARIOS BIOACTIVOS A PARTIR DE *TRICHODERMA* SPP

Yuset Louis Guevara¹, Giselle Hernández Campoalegre¹, Amaia Ponce de la Cal², Yamilé Baró Robaina², Yamilet Coll García¹, Iraida Spengler Salabarría¹

¹ Centro de Estudios de Productos Naturales (CEPN), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

² Instituto de Sanidad Vegetal (INISAV), La Habana, Cuba.

E-mail: louisguevarayusset@gmail.com

RESUMEN:

Las estrategias de desarrollo sostenible incluyen la sustitución de productos químicos empleados en la agricultura por otros que tengan una base biológica. La elaboración y aplicación en Cuba de bioproductos para el manejo de las plagas en los cultivos, contribuye a la sustitución de importaciones de este tipo de insumos agrícolas, manteniendo una relación amigable con el medio ambiente. El objetivo de este trabajo fue identificar familias de metabolitos secundarios presentes en el extracto de acetato de etilo de tres aislados de *Trichoderma* (LBAT-53, LBAT-15 y LBAT-1) mediante tamizaje químico. El crudo de metabolitos se obtuvo mediante extracción líquido-líquido con acetato de etilo a partir del caldo de fermentación y se determinó la composición química cualitativa, según la metodología descrita por Rondina y Cossio con ligeras modificaciones. El tamizaje químico de los tres extractos de *Trichodermas*, permitió detectar semejanzas y diferencias en cuanto a la composición química cualitativa de las muestras. En ninguna se detectó la presencia de alcaloides, proantocianidinas / catequinas, cardenólidos ni triterpenos libres y solo en el extracto de la cepa LBAT-53 se identificó la presencia de compuestos fenólicos. Los ensayos para la detección de grupos amino, quinonas y azúcares reductores fueron positivos en los tres extractos analizados. Varias estructuras de las familias de compuestos detectados, se ha demostrado que ejercen un efecto inhibitorio del crecimiento de patógenos que afectan diversos cultivos agrícolas. Estos resultados apoyan el uso potencial de *Trichoderma* spp. y sus metabolitos como una alternativa para el control de fitopatógenos.

Palabras clave: Hongos, Tamizaje químico, Metabolitos bioactivos.

RECUPERACIÓN Y AUTOMATIZACIÓN DE EQUIPOS UTILIZANDO LA PLATAFORMA ARDUINO

Frank Remedios Almeyda, Javier Martínez Pons, Osmel Cruzata Montero, José A. Herrera Isidrón, Mayra P. Hernández Sánchez

Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: remedios@imre.uh.cu

RESUMEN:

La recuperación de equipos antiguos mediante el uso de Arduino se ha convertido en una alternativa sostenible y económica, especialmente en contextos donde la escasez de recursos impulsa la reutilización y adaptación tecnológica. Este trabajo presenta la automatización de un espectrofotómetro de red de difracción LOMO MDR-23 utilizando la placa de desarrollo Arduino UNO, así como la recuperación de una máquina CNC para la creación de prototipos de PCB y del plotter MP-1000. En el espectrofotómetro, se mejoró la precisión mediante la adaptación de un encoder de cuadratura al eje de transmisión, lo que permitió alcanzar una mayor resolución y establecer un lazo cerrado en el sistema de desplazamiento. El Arduino controla el motor de pasos enviando señales de paso y dirección, y contando los pulsos generados por el encoder, evita pérdidas de pasos y garantiza un funcionamiento eficiente. En la máquina CNC, Arduino actúa como el controlador principal, gestionando los movimientos de los motores paso a paso, interpretando el código G e integrando sensores y actuadores. Por su parte, en el plotter MP-1000, Arduino funciona como intérprete de los comandos enviados desde la PC, resolviendo problemas de comunicación entre los dispositivos. En conclusión, la implementación de Arduino en estos equipos demuestra ser una solución efectiva y versátil para revitalizar tecnología obsoleta, optimizando sus funcionalidades y adaptándola a nuevas necesidades técnicas.

Palabras clave: *Arduino, Automatización, Recuperación, CNC.*

CONSTRUCCIÓN DE BRAZO REGULABLE PARA PLOTTER XY

Osmel Cruzata Montero¹, Jomarien García Couce², Lilliam Becherán Marón¹, Frank Remedios Almeyda¹, Alejandro Durán Carrillo de Albornoz¹, Malena Perera Linares³

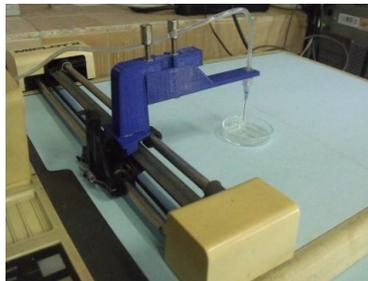
¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Biomateriales (CEBIO) Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Universidad Tecnológica de La Habana (CUJAE), La Habana, Cuba.

E-mail: osmel@imre.uh.cu

RESUMEN:

Las limitaciones para la adquisición del equipamiento necesario en el trabajo docente e investigativo, hacen cotidiano la adaptación de equipos de propósito general en otros de prestaciones específicas. En el presente trabajo se realizó la modificación de un Plotter XY modelo MP-1000 en un dispensador para el estudio de estructuras poliméricas. Para ello, fue reparado el circuito electrónico y se reprogramaron los parámetros de movimiento en ambos ejes de plotter. Seguidamente, se diseñó un brazo compuesto por tres piezas que aseguraran la variación de la altura del dispensador y garantizaran la rigidez y repetitividad del trazado. Dichas piezas se diseñaron en AutoDesk Inventor y fueron construidas mediante Fabricación Aditiva en una impresora Ender-3 empleado **PETG** (copolímero poli(tereftalato de etileno)-glicol, *polyethylene terephthalate-glicol* por sus siglas en inglés), un material termoplástico muy utilizado para la tecnología FDM (Fused Deposition Modeling). Como resultado se logró continuar los estudios de la tesis "Preparación de estructuras poliméricas por deposición-coagulación empleando un plotter MP-1000" discutida satisfactoriamente en el año 2025 por la estudiante Malena Perera Linares para su graduación como Ingeniera Biomédica en la Facultad de Automática y Biomédica. De este modo, la aplicación de la Fabricación Aditiva sigue ayudando a que los procesos de formación educativa de los nuevos profesionales no se detengan y se logre dar nueva utilidad a equipos aún se mantienen en nuestros centros y laboratorios.

Palabras clave: *Modificación, Polímero, Fabricación Aditiva.*



Comisión: Materiales para la conversión y almacenamiento de energía
Conferencia invitada

MATERIALS AND INTERFACES IN SOLID-STATE BATTERIES

Alex Rettie

University College London

E-mail: a.rettie@ucl.ac.uk

ABSTRACT:

The development of next generation batteries is crucial to meeting Net Zero goals. Solid-state batteries promise improved performance and safety compared to conventional Li-ion cells, but their development is hindered by complex solid-solid interfaces and degradation processes during cycling. In this talk, I will present our recent efforts in this area on three related fronts: (i) solid-state electrochemical mechanics, (ii) design of scalable electrolytes and (iii) characterisation of disordered energy materials. The importance of combined experimental and modelling approaches will be highlighted.

Keywords: *Energy storage, Solid state, Solution processing.*

Presentaciones orales

DIELECTRIC AND PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF LEAD-FREE FERROELECTRIC CERAMICS PRODUCED BY HIGH-POWER ULTRASOUND TECHNIQUE

V.V. Rubanik¹, A.D. Shilin¹, V.V. Rubanik jr.¹, V.K. Frolov¹, A.V. Girão², A.N. Salak², Y. Pérez-Martín³, A. C. Iglesias-Jaime³, Y. González Abreu³, M. A. S. Mariano⁴, Tongqing Yang⁵, J.D.S. Guerra⁴, A. Peláiz-Barranco^{3*}

¹ Institute of Technical Acoustics of NAS of Belarus, General Lyudnikov Avenue, 13, Vitebsk, 210009, Belarus. ² DEMaC-CICECO, University of Aveiro, Aveiro, 3810-193, Portugal. ³ Grupo de Materiales Ferroicos, Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ⁴ Grupo de Ferroelétricos e Materiais Multifuncionais, Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Minas Gerais, Brazil. ⁵ Functional Materials Research Laboratory, College for Materials Science and Engineering, Tongji University, Shanghai, China.

E-mail: pelaiz@fisica.uh.cu

ABSTRACT:

The physical properties have been investigated in $(\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5})_{1-x}\text{Ba}_x\text{TiO}_3$ ceramics, where $x = 10, 12, 16$ at% Ba (BNT–xBT), synthesized *via* the high-power ultrasound technique. For the production of the samples, several stages have been considered, by using an output power of 1kW with a frequency of 22 kHz for sonication. The stoichiometric mixtures of the starting chemicals, as well as the obtained powders after calcination, were sonicated in ethanol, in order to ensure better homogeneity of the chemical composition. High-power ultrasound has been also applied to a die set when pressing the powder into a compact to homogenize stress distribution in the pressed compact and thereby reduce appearance of cracks, as well as to improve quality of the surface layers. The structural, dielectric and piezoelectric behaviors have been analyzed, and compared with the same compositions obtained by the standard solid-state reaction method.

Keywords: *Ferroelectrics, Ceramics, Ultrasound technique, Lead-free, Piezoelectricity.*

PANORÁMICA DE LA OBTENCIÓN DE TiO_2 POR VÍA ELECTROLÍTICA

Adrian Sánchez Rodríguez¹, Fresnel Forcade Zamora², Yamilet Rodríguez Lazcano³, Ernesto Peláez Abellán¹

¹ Facultad de Química, Universidad de la Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), La Habana, Cuba. ³ Unidad Académica de Ciencias Básicas e Ingenierías, Universidad de Nayarit, Tepic, México.

E-mail: adriansr1304@gmail.com

RESUMEN:

La síntesis controlada de nanoestructuras con actividad catalítica es uno de los principales retos que dificultan la aplicación práctica de muchas reacciones electrocatalíticas importantes relacionadas con la energía. En comparación con los métodos convencionales de síntesis húmedo-química, en estado sólido y por deposición de vapor, la síntesis electroquímica representa un método simple, rápido, rentable y de control preciso para la preparación de materiales catalíticos altamente eficientes. Debido a estas ventajas operativas, junto con su alta capacidad de ajuste de propiedades estructurales, en el Grupo de Electroquímica Aplicada (GEA), de la Facultad de Química, Universidad de La Habana, se ha desarrollado una tecnología (patente CU-24436, 2019) utilizando un método electroquímico para obtener dióxido de titanio (TiO_2). Este trabajo se centra en dar una panorámica de las características del proceso electrolítico puntualizando la influencia de las condiciones experimentales de este proceso electrolítico en las características estructurales y morfológicas del TiO_2 obtenido, lo que a su vez influye en sus propiedades ópticas y eléctricas para su aplicación como fotoelectrodo. El objetivo es establecer una metodología de síntesis nacional capaz de producir nano-óxidos comparables a los internacionales (Degussa P-25), con el fin de revolucionar sus aplicaciones en energías renovables y tratamiento de contaminantes. Este análisis permitirá ajustar el proceso para obtener materiales nanoestructurados más efectivos y sostenibles.

Palabras clave: *Síntesis electroquímica, Nanoestructuras catalíticas, propiedades del TiO_2 .*

OBTENCIÓN DE TiO₂ NANOESTRUCTURADO A PARTIR DE TITANIO RECICLADO PARA SU APLICACIÓN COMO FOTOELECTRODO

César Caballero Serrano¹, Fresnel Forcade Zamora², Yamilet Rodríguez Lazcano³, Ernesto Peláez Abellán¹

¹ Facultad de Química, Universidad de la Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ³ Unidad Académica de Ciencias Básicas e Ingenierías, Universidad de Nayarit, Tepic, México.

E-mail: caballerocezarale@gmail.com

RESUMEN:

En los últimos años la comunidad científica ha mostrado un considerable interés en el dióxido de titanio (TiO₂) debido a su uso como fotocatalizador, pigmento blanco, aditivo en protectores solares y cosméticos, y componente en dispositivos avanzados como las celdas solares y los sensores. Particularmente, su forma nanoestructurada lo hace crucial para la conversión de la energía solar. Controlar su síntesis es clave para mejorar la eficiencia de las celdas solares y la producción de hidrógeno por fotólisis del agua. La nanoestructura incrementa la relación superficie real/volumen del material, lo que favorece las reacciones de oxidación-reducción que tienen lugar en la interfaz electrolito/semiconductor en una celda foto-electroquímica. Además, facilita la fotólisis del agua, produciendo oxígeno e hidrógeno, un combustible limpio, conocido como *El Combustible del Futuro*. El hidrógeno es fundamental para una economía sostenible, un vector energético versátil para celdas de combustible, almacenamiento y transporte, sustituyendo a los combustibles fósiles. Este estudio presenta modificaciones en la producción del nano-óxido de TiO₂ electrolítico según patente cubana **CU-24436, 2019**, lo que lo hace más versátil y eficiente. La caracterización mediante difracción de rayos X confirma el predominio de la estructura cristalina anatase, mientras que el análisis termogravimétrico indica una alta densidad de grupos -OH en la superficie nanoestructurada. Esto contribuye a mejorar las propiedades electrónicas superficiales del polvo nanométrico de TiO₂, facilitando así, futuras aplicaciones.

Palabras clave: TiO₂ nanoestructurado, Fotocatálisis, Energía solar, Fotólisis del agua, Hidrógeno.

CO-DOPAJE ESTRUCTURAL DEL NMC111 CON HIERRO Y FÓSFORO PARA BATERÍAS DE ION LITIO

Roberto Domínguez-Rodríguez¹, Adrián Enríquez-Martínez¹, Ana Laura Díaz Perera¹, Yoan Javier Pérez Avilés¹, Nicolás Sirgado Pérez¹, Marlene González Montiel², Yosuan Ávila García², Manuel Ávila-Santos², Yodalgis Mosqueda-Laffita¹, Eduardo Lázaro Pérez Cappe¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Instituto Politécnico de México-CICATA Legaria, Ciudad de México, México.

E-mail: roberto.dominguez@imre.uh.cu

RESUMEN:

La familia de materiales catódicos Li-NMC ($LiNi_xMn_yCo_{1-x-y}O_2$ $0.33 \leq x \leq 0.85$, $0.075 \leq y \leq 0.33$) comprende los óxidos más populares y ampliamente utilizados en el campo de las baterías de ion litio. Por ello, aplicar un método de síntesis propio y escalable, para transformarlo en un material multifuncional con capacidad para desempeñarse en celdas de Li bajo campo magnético o luz, constituye un punto de partida en el propósito de dominar estas tecnologías disruptivas. En este trabajo se explora por primera vez el codopaje del óxido Li-NMC111 con hierro (Fe^{3+}) y fósforo (P^{5+}) y se presentan los resultados de la caracterización por técnicas estructurales, morfológicas, magnéticas y ópticas. Los resultados demuestran la utilidad del método de síntesis aplicado para obtener el Li-NMC111 con la estructura laminar deseada para su aplicación en baterías de ion-Li y que este puede alojar simultáneamente ambos dopantes, lo que causa un aumento de las dimensiones de la celda unitaria, del tamaño de las partículas, del momento magnético efectivo y de la absorción luminosa.

Palabras clave: NMC111, Codopaje Fe-P, Materiales multifuncionales, Baterías de ion-Li.

EFFECTOS DE LA RADIACIÓN GAMMA DE ^{60}Co EN LOS MATERIALES CATÓDICOS PARA BATERÍAS DE LITIO LNMO Y LMO

Yoan Javier Pérez Avilés¹, Ana Laura Díaz Perera¹, Adrián Henríquez Martínez¹, Antonio Leyva Fabelo², Manuel Ávila Santos³, Nicolás Sirgado Pérez¹, Yodalgis Mosqueda Laffita¹, Eduardo Lázaro Pérez Cappe¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN), La Habana, Cuba. ³ Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada (CICATA-Legaria), Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México.

E-mail: pyoanjavier@gmail.com

RESUMEN:

Entre los aspectos que influyen en el buen comportamiento de las baterías comerciales de litio están; la morfología, la estructura cristalina, la estabilidad térmica y la conductividad eléctrica de los materiales empleados como elementos activos del cátodo. En este trabajo se aborda por primera vez los efectos de la radiación gamma (γ) a bajas dosis sobre las propiedades de los materiales catódicos LiMn_2O_4 (LMO) y $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ (LNMO) con el objetivo de explorar su uso para mejorar el rendimiento de las baterías de Li. Las muestras se irradiaron usando una fuente de ^{60}Co a cinco dosis entre 1 y 50 kGy. Del análisis de la estructura resultó que para ciertas dosis la radiación causó un mejoramiento del ordenamiento iónico en la estructura de los materiales, lo que es muy deseado para la aplicación electroquímica. También se observó una disminución de los tamaños de partículas, aunque se mantuvo la misma morfología observada en la muestra no irradiada. Por otra parte, mediante técnicas basadas en principios físico-químicos diferentes, se evaluó la estabilidad térmica, observándose que para ninguna de las dosis empleadas la radiación provocó un empeoramiento de la estabilidad térmica. Además, mediante una simulación por Monte Carlo assisted Classical Method (MCCM) y Monte Carlo N-Particle eXtended (MCNPX) fue estimada la sección eficaz para los desplazamientos atómicos de cada átomo en ambos materiales, así como el número de desplazamientos por átomo; esto se relacionó con los cambios provocados en las propiedades de los materiales LMO y LNMO.

Palabras clave: LMO, LNMO, radiación gamma, estabilidad estructural, desplazamientos atómicos.

PREPARACIÓN EN MEDIO ACUOSO DE RECUBRIMIENTOS AMORFOS DE TiO_2 SOBRE PARTÍCULAS DE LNMO

Ana Laura Díaz Perera¹, Adrián Enríquez Martínez¹, Yoan J. Pérez Avilés¹, Carlos Ricardo Milián-Pila¹, Nicolás Sirgado Pérez¹, Yosuan Ávila García², Juan Jiménez Chacón¹, Manuel Ávila-Santos², Yodalgis Mosqueda-Laffita¹, Eduardo Lázaro Pérez-Cappe¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada (CICATA-Legaria), Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México.

E-mail: alauradiazperera@gmail.com

RESUMEN:

El $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ (LNMO) es un material prometedor para cátodos de alto voltaje en las baterías de ion litio, pero por reacciones con el electrolito su capacidad se degrada. Esto puede evitarse con recubrimientos superficiales del material activo del cátodo. En este trabajo se aplicó un método de síntesis vía citrato en medio acuoso para recubrir el LNMO con TiO_2 amorfo. Se utilizó un LNMO de origen comercial y además para establecer comparaciones se recubrió sobre un LNMO preparado en el laboratorio. Se obtuvieron tres recubrimientos y se evaluó la composición, morfología, estabilidad térmica y conductividad electrónica. Se emplearon para la caracterización: Fluorescencia de Rayos X, Microscopía Electrónica de Barrido, Difracción de Rayos X, Espectroscopía Raman, Espectroscopía Infrarroja con Reflectancia Total Atenuada y técnicas térmicas como ATD y TG. La conductividad electrónica se midió por el Método de Kelvin. Con un sensor de óxido de circonio estabilizado con itrio se midieron las presiones parciales de oxígeno emanadas del material a altas temperaturas como medida indirecta de la efectividad del recubrimiento. Entre los recubrimientos preparados, se propone el LNMO-T3, pues la fase amorfa de TiO_2 cubrió homogéneamente las partículas de LNMO con una morfología que se asemeja al recubrimiento físico de tipo núcleo-capa, con una mayor estabilidad térmica y una conductividad electrónica similar a la del material núcleo LNMO. Además, se halló una relación entre la morfología del grano núcleo y la cristalinidad del material de recubrimiento que se depositó sobre este.

Palabras clave: *Recubrimiento superficial amorfo, LNMO, TiO_2 , Baterías de ion litio.*

DESARROLLO DE FUNCIONALIDAD MAGNÉTICA EN ESPINELAS LNMO CO-DOPADAS PARA CÁTODOS DE BATERÍAS MAGNETO-ASISTIDAS

Adrián Enríquez Martínez¹, Renier Arabolla Rodríguez², Manuel Ávila Santos³, Marlene González Montiel³, Jesús Vega Moreno³, Yosuan Ávila García³, José Miguel Delgado Galindo⁴, Jordi Jacas Biendicho⁴, Yodalgis Mosqueda Laffita^{1*}, Eduardo L. Pérez Cappe^{1*}

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Paul Scherrer Institute PSI, Villigen, Switzerland. ³ Instituto Politécnico de México-CICATA Legaria, Ciudad de México, México. ⁴ IREC, Catalonia Institute for Energy Research. Jardins de les Dones de Negre 1, 08930. Sant Adrià de Besòs, Spain.

E-mail: cappe@imre.uh.cu, yodalgis@imre.uh.cu

RESUMEN:

Un nuevo horizonte se abre dentro de la tecnología del litio para el almacenamiento de energía: los cátodos funcionalizados para baterías asistidas por campo magnético y excitación luminosa. En este trabajo desarrollamos funcionalidad magnética en el material catódico $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ (LNMO) para baterías de iones de litio magneto asistidas. Se implementa una estrategia de codopaje con $(\text{PO}_4)^{3-}$ y Fe^{3+} en un amplio intervalo de composiciones (0 – 15% de Fe y 0 – 7.5% de P) por un método sol-gel, vía citrato y se realiza una exhaustiva caracterización composicional, estructural y morfológica que permitió optimizar los niveles de dopaje. Fue llevado a cabo un estudio de las propiedades magnéticas en todo el intervalo composicional y se reporta un incremento en más de 2 magnetones de Bohr del momento magnético efectivo del material optimizado, así como un aumento en más de 15 mAh/g de su capacidad en celdas magneto asistidas para corrientes entre C/5 y 3C. Igualmente se logra extender la vida útil de una celda electroquímica con 1000 ciclos de carga/descarga al aplicar un campo magnético estático de 40 mT y realizar otros 500 ciclos con capacidad incrementada en más de 20 mAh/h.

Palabras clave: *Batería de Litio, LNMO, Multifuncionalidad, Magnetismo y materiales.*

COMPORTAMIENTO ESTRUCTURAL, DIELECTRICO Y DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA DEL SISTEMA CERÁMICO $(\text{Pb}_{0.97}\text{La}_{0.02})(\text{Zr}_{0.80}\text{Sn}_{0.12}\text{Ti}_{0.08})\text{O}_3$ QUE MUESTRA DOS FASES ANTIFERROELÉCTRICAS

Yoniel Pérez Martín¹, M. A. S. Mariano², Aimé Peláiz Barranco^{1,2,3}, José de los Santos Guerra², Tongqing Yang³

¹ Grupo de Materiales Ferroicos, Facultad de Física – IMRE, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Grupo de Ferroelétricos e Materiais Multifuncionais, Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Minas Gerais, Brazil. ³ Functional Materials Research Laboratory, School of Materials Science and Engineering, Tongji University, Shanghai, China.

E-mail: yonielmartin@gmail.com

RESUMEN:

La creciente demanda de dispositivos electrónicos más pequeños y eficientes resalta las limitaciones de las baterías y supercondensadores actuales. Los condensadores dieléctricos, con alta densidad de potencia y capacidad de miniaturización, emergen como una alternativa prometedora. En este contexto, los materiales antiferroeléctricos (AFE) han ganado atención por sus bajas pérdidas de energía y alta densidad de almacenamiento. Materiales como el zirconato titanato de plomo (PZT) y sus variantes dopadas (PLZT, PLZST) adquieren especial relevancia, principalmente cerca de la frontera de fase morfotrópica AFE-FE. En busca de mejorar sus propiedades, este estudio se enfoca en el sistema cerámico $(\text{Pb}_{0.97}\text{La}_{0.02})(\text{Zr}_{0.80}\text{Sn}_{0.12}\text{Ti}_{0.08})\text{O}_3$, el cual se sintetizó mediante el método convencional de reacción en estado sólido. Se investigaron sus propiedades estructurales, dieléctricas y de almacenamiento de energía. Los análisis estructurales se llevaron a cabo a partir de las técnicas de difracción de rayos X y Microscopía Electrónica de Barrido. Los resultados confirmaron la formación de la estructura perovskita, mostrando la coexistencia de dos fases antiferroeléctricas con simetrías tetragonal (P4mm) y ortorrómbica (Pba2). El análisis dieléctrico reveló una única anomalía dieléctrica, asociada a una transición de fase antiferroeléctrica-paraeléctrica. El estudio de almacenamiento de energía se realizó a partir de la dependencia del campo eléctrico con la polarización (curvas P–E) a 60 kV/cm, cubriendo un amplio rango de temperaturas. Los resultados demostraron una alta eficiencia (~60 %) y densidad de almacenamiento de energía (~0.5 J/cm³) respecto a sistemas similares reportados en la literatura, lo que evidencia las propiedades funcionales de este sistema para aplicaciones en dispositivos de almacenamiento de energía.

Palabras clave: Energía, Antiferroeléctricos.

Carteles

MAGNETIC STUDY OF WIDE-RANGE RARE EARTH SUBSTITUTION IN BaM HEXAFERRITE

Jael Faloh-Gandarilla¹, Sergio Díaz-Castañón², José Raúl Correa Reina³,

Francisco Calderón-Piñar⁴

¹ Grupo Materiales Ferroicos, Facultad de Física-IMRE, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

² División de Materiales Avanzados, Instituto Potosino de Investigación Científica, San Luis Potosí, México. ³ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ⁴ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: jaelfaloh@gmail.com, cristina@fisica.uh.cu

ABSTRACT:

Hexaferrites (M) are widely used as permanent magnet materials due to their good magnetic behavior and low costs. In the three main types of hexaferrites substitutions with rare earth ions have been reported, although some authors found a limit to their solubility. The study of the coercive field with La substitution has received attention in relation to the high anisotropy field of lanthanum hexaferrite. The results reported are very contradictory, since while there are studies that report improvements in the magnetic properties with these substitutions, others report a scarce variation in these properties. This inconsistency also occurs due to the fact that the studies refer to different methods of obtaining and different dopant ranges, which makes it difficult to compare the different reports. We present a study on ceramic Ba-M hexaferrite doped with La and Gd, so that a wide range of substitutions can be compared, even reaching the solubility limit but also covering the low substitution range. The variation of the anisotropy and coercive fields was studied. A non-monotonic variation of the magnetic properties with substitution was found and then we can report an optimal substitution range. This non-monotonic behavior may also explain the inconsistency of the previous reports. A contradictory behavior between the coercive and anisotropy fields was also found for the highest substitution values.

Keywords: Hexaferrites, Magnetic characterization, Rare earth doping, Coercivity, Magnetization.

VARIACIONES EN LA ENTROPÍA MAGNÉTICA EN EL SISTEMA MULTIFERROICO $\text{Bi}_5\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Ti}_3\text{O}_{15}$ DOPADO CON TIERRAS RARAS EN EL RANGO DE BAJAS TEMPERATURAS

Y. González-Abreu¹, K. Alvarez-Rojas¹, A. Peláiz-Barranco¹, A. F. Kraidy², Y. Gagou², M. A. S. Mariano³, J. D.S. Guerra³

¹ Grupo de Materiales Ferroicos, Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² LPMC, Université de Picardie Jules Verne, Amiens, Cedex, France. ³ Grupo de Ferroeléctricos e Materiais Multifuncionais, Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia – MG, Brasil.

E-mail: yusling@fisica.uh.cu

RESUMEN:

Se estudia el sistema cerámico de $\text{Bi}_5\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Ti}_3\text{O}_{15}$ y dopado con tierras raras para aplicaciones futuras relacionadas con el efecto magnetocalórico en el rango de temperaturas, desde 300 K hasta 2 K. La difracción de rayos X a temperatura ambiente muestra una fase principal ortorrómbica $A2_1am$ y algunas reflexiones sugieren la presencia de una fase secundaria ortorrómbica menos distorsionada $Fmm2$. Se analiza el comportamiento termomagnético al aplicar campos magnéticos desde 530 Oe hasta 20 kOe. Se estudian las variaciones de la entropía magnética (ΔS_M) debido a posibles transiciones relacionadas con el cambio en la naturaleza del comportamiento multiferroico. Se analiza el origen de esta variación en función de los efectos de los cationes Fe^{3+} y Co^{3+} , y de los elementos de tierras raras.

Palabras clave: *Aurivillius, Entropía magnética, Multiferroicos.*

EFFECT OF THICKNESS ON MORPHOLOGICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED ZnO THIN FILMS DEPOSITED BY ULTRASONIC SPRAY PYROLYSIS

Javier Pérez-Pérez¹, Edwin Pedrero¹, Yamilet Rodríguez-Lazcano², José. A. Rodríguez¹

¹ Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba. ² Basic Science and Engineering Academic Unit, Autonomous University of Nayarit, Cultural City, Tepic, Nayarit, México.

E-mail: jar@imre.uh.cu

ABSTRACT:

Among semiconductor metal oxides, zinc oxide (ZnO) is one of the most studied by the scientific community last years, due to its unique chemical and physical properties. Its direct wide bandgap (3.37 eV), high exciton binding energy (60 meV), enhanced radiative recombination efficiency, and high thermal and mechanical stability at room temperature, make this material an attractive candidate for applications in electronic and optoelectronic devices, such as photodetectors, solar cells and resistive gas sensors. Simple and low-cost deposition techniques, easily scalable to mass production, should be used. A homemade ultrasonic spray pyrolysis (USP) set-up was developed and nanostructured ZnO thin films were deposited on glass substrates. All deposition parameters were fixed, but the deposition time, thus obtaining films with different thicknesses. Measurements were directed to follow the growth process through time. Films were studied by X-ray diffraction (XRD), UV–Vis spectroscopy, profilometry and scanning electron microscopy (SEM). Bandgap and Urbach energies as well as microstructural parameters were calculated. The films are polycrystalline with preferential growth in the direction normal to the (101) planes and exhibit a single phase hexagonal wurtzite microstructure. Surface reactions of the gas-solid type seems to dominate the deposition. Initially, the films exhibit granular (nanostructured) growth. As thickness increases, granular growth ceases and the formation of grain aggregates begins, thus transforming the film surface from specular to opaque. Therefore, film morphology and optical properties depend on thickness, whereas the microstructural parameters do not show appreciable variations.

Keywords: *Zinc oxide, Ultrasonic spray pyrolysis, Optical properties.*

OBTENCIÓN DE PELÍCULA DE CuO NANOESTRUCTURADA SOBRE VIDRIOS CONDUCTORES FTO E ITO A TRAVÉS DE LA TÉCNICA DE BAÑO QUÍMICO ACTIVADO POR MICROONDAS

Bernardo González Ramírez¹, Inti Zumeta Dube², Yamilet Rodríguez Lazcano³, Fresnel Forcade Zamora¹, Enue Barrios Salgado⁴, Disnel Ferrera Carracedo⁵, Edismel Gomero Hernández⁶

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Centro de Investigación en Ciencias Aplicadas y Tecnología Avanzada, Instituto Politécnico Nacional, D.F., México. ³ Unidad Académica de Ciencias Básicas e Ingenierías, Universidad Autónoma de Nayarit, Tepic, México. ⁴ Instituto de Energía Renovable, Universidad Nacional Autónoma de México, México. ⁵ Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ⁶ Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

E-mail: bernardo@imre.uh.cu

RESUMEN:

El óxido de Cu(II) nanoestructurado recibe gran atención por la comunidad científica debido a sus propiedades *sui generis* y atractivas aplicaciones como: actividad antibacteriana, sensores, baterías de litio, calefacción solar, fotodetectores, entre otras. En el presente trabajo se han obtenido y estudiado películas de CuO muy bien adheridas sobre sustratos de vidrios conductores ITO (óxido de indio dopado con estaño) y FTO (óxido de estaño dopado con flúor) mediante deposición química en baño activado por microondas (MW-CBD), a baja temperatura y en un corto periodo de tiempo. La difracción de rayos X y la espectroscopía Raman muestran que solo está presente la fase tenorita de CuO en ambos sustratos. La microscopía electrónica de barrido revela una morfología nanoestructurada peculiar: nanohilos o nanoramificaciones. Las capas resultantes tienen un valor de gap en ambos sustratos de $E_g = 1.58 \pm 0.04$ eV, estimado a partir del espectro UV-vis de reflectancia difusa. Para la continuidad del trabajo se proyecta profundizar en el estudio comparativo de las propiedades de las capas obtenidas en los diferentes sustratos, y la factibilidad de su uso en aplicaciones solares.

Palabras clave: CuO, ITO, FTO, MW-CBD, Sustratos.

FABRICATION AND CHARACTERIZATION OF PbS THIN FILM FOR SOLAR CELL APPLICATION

K. D. Iznaga-Pino¹, A. Casanova-Díaz¹, F. Solis-Pomar², E. Pérez-Tijerina², R. Gonzalez-Arrabal^{3,4}, J. Olivares^{5,6}, A. Fundora-Cruz¹

¹ Instituto Superior de tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, La Habana, Cuba. ² Universidad Autónoma de Nuevo León, Centro de Investigación en Ciencias Físico Matemáticas, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Nuevo León, México. ³ Instituto de Fusión Nuclear Guillermo Velarde, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España. ⁴ Departamento de Ingeniería Energética ETSI Industriales, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España. ⁵ Centro de Microanálisis de Materiales, Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, Madrid, España. ⁶ Instituto de Óptica Daza de Valdés (CSIC), Madrid, España.

E-mail: kissy@instec.cu

ABSTRACT:

Nanostructured PbS thin films were deposited on BK7 substrates at room temperature by radio frequency sputtering technique varying the deposition power from 50 to 150 W while keeping constant other deposition parameters (argon flow at 80 sccm for 30 min). X-ray diffraction (XRD) data show that all films are polycrystalline having a preferential orientation along the (200) direction. Atomic force microscopy (AFM) evidences that the films present a nanostructured growth, with particle sizes between 6 and 8 nm. Rutherford backscattering spectroscopy (RBS) data show that for films deposited at $P \leq 90$ W, the elemental composition of the films depends on the deposition power, rising the sputtering power from 50 to 90 W increases the atomic concentration of S and decreases that of Pb. For films deposited at $P > 90$ W, no dependence of the elemental concentration on sputtering power was observed. The radiation behavior of the films was characterized by in-situ optical measurements. For this purpose, the transmittance and reflectance of the films were monitored as a function of fluence during H irradiation at an energy of 3 MeV (simulating the space conditions) for future solar cells applications.

Keywords: *Nanostructured growth, Thin films, Room temperature, Irradiation.*