



Universidad Nacional Autónoma de México Consorcio Académico nanoUNAM

10 y 11 de Noviembre de 2009 Ensenada, Baja California, México

Gian Carlo Delgado y Noboru Takeuchi (coordinadores)

Programa y Libro de Resúmenes

# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO







## **Directorio**

Dr. José Narro Robles Rector

- Dr. Sergio Alcocer Martínez de Castro Secretario General
- Dr. Carlos Arámburo de la Hoz
   Coordinador de la Investigación Científica
  - Dra. Estela Morales Campos Coordinadora de Humanidades
  - Dr. Jaime Martuscelli Quintana
     Coordinador de Innovación y Desarrollo
    - Dra. Norma Blazquez Graf Directora del CEIICH
    - Dr. Sergio Fuentes Moyado Director CNyN
      - Dr. José Saniger Blesa Director CCADET



## Ensenada Baja California, México http://www.ceiich.unam.mx/nanomex09/

### **Organizadores**

Dr. Gian Carlo Delgado, Centro de Investigaciones Interdisciplinarias en Ciencias y Humanidades, UNAM.

Dr. Noboru Takeuchi, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.

### Coordinador de vinculación internacional

Dr. Ernesto Marinero, Hitachi San José Research Center.

### Coordinador de vinculación en Baja California

Lic. Marco A. Moreno, Consejo Estatal de Ciencia y Tecnología de Baja California.

### Coordinador de difusión

Lic. Gerardo Sánchez García, Grupo Radiorama

#### Comité Asesor Científico

Dr. Sergio Alcocer Martínez de Castro, Secretario General, UNAM.

Dr. Carlos Arámburo de la Hoz, Coordinador de la Investigación Científica, UNAM.

Dra. Norma Blazquez Graf, Directora del Centro de Investigaciones Interdisciplinarias en Ciencias y Humanidades, UNAM.

Dr. Sergio Fuentes Moyado, Director del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.

Dr. Jaime Martuscelli Quintana, Coordinador de Innovación y Desarrollo, UNAM

Dr. Luis Mochán Backal, Director del Instituto de Ciencias Físicas, UNAM.

Dra. Estela Morales Campos, Coordinadora de Humanidades, UNAM.

Dr. León Olivé Morett, Investigador del Instituto de Investigaciones Filosóficas, UNAM.

Dr. José Saniger Blesa, Director del Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo

Tecnológico y Coordinador del Programa Universitario de Nanotecnología Ambiental, UNAM.

Dr. Ricardo Vera Graciano, Director del Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM.

- Dr. Guillermo Monsivais Galindo, Director del Instituto de Física, UNAM.
- Dr. Ignacio Garzón Sosa, Investigador del Instituto de Física, UNAM.
- Dr. Vladimir Basiuk, Investigador del Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM.
- Dr. Rafael Vázquez Duhalt, Investigador del Instituto de Biotecnología, UNAM.
- Dr. Leonel Cota Araiza, Investigador del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.
- Dr. Miguel José Yacamán, Director del Departamento de Física, Universidad de Texas-San Antonio, UTSA (EUA).
- Dr. Sergio Ulloa, Investigador del Departamento de Física, Universidad de Ohio (EUA).
- Dr. Humberto Terrones, Investigador del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, IPICYT.

### Comité Local

Dr. Leonardo Morales de la Garza. Investigador del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.

Dra. María Guadalupe Moreno. Investigadora del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.

Dr. Ernesto Cota Araiza. Investigador del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.

Dr. Alexei Licea Navarro. Investigador del Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California.

Dr. Alejandro Martínez Ruiz. Investigador de la Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California.

Dr. Manuel Herrera Zaldivar. Investigador del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.

Dr. Wencel De La Cruz. Investigador del Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.

## **PRESENTACIÓN**

NanoMex'09 es el II Encuentro Internacional e Interdisciplinario en Nanociencia y Nanotecnología organizado por la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Busca impulsar el diálogo interdisciplinario de alta calidad sobre los avances reales, promesas e implicaciones de la nanotecnología con el objeto de enriquecer la toma de decisiones nacionales referentes a la maximización y distribución de beneficios, la definición de responsabilidades y la minimización de costos innecesarios o indeseados.

Se realizará en la ciudad de Ensenada, en el marco de la celebración conmemorativa de los 30 años de presencia de la UNAM en Baja California. Es una iniciativa original del grupo nano-UNAM, conformado inicialmente por el Centro de Investigaciones Interdisciplinarias en Ciencias y Humanidades, el Centro de Nanociencias y Nanotecnología, el C Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico y el Programa Universit Nanotecnología Ambiental

En esta edición, nano-UNAM busca enfocarse en las áreas de las Nanociencias y la Nanotecnología que estima estratégicas para el país. En tal sentido, se dará prioridad a los siguientes ejes temáticos:

- 1. Nanociencia y Nanotecnología en biología y medicina
- 2. Energía y Medio Ambiente.
- 3. Nanomateriales.
- 4. Nanociencia y Nanotecnología en agricultura, ganadería y alimentación.
- 5. Eco-toxicidad, y regulación de nanomateriales y, estandarización.
- 6. Aspectos éticos, sociales y legales de la nanotecnología.
- 7. Educación y divulgación de la nanociencia y la nanotecnología.

En las sesiones de investigación, buscamos incluir trabajos experimentales, teóricos y de nanociencia computacional.

Se extiende la invitación a nuestros colegas a debatir, analizar y proponer alternativas en un contexto amplio, abierto e interdisciplinario que incluya toda una gama de especialistas provenientes de las ciencias exactas, las ciencias naturales, las ciencias sociales y las humanidades; del sector empresarial; de la esfera política; entre otros.

Noboru Takeuchi Gian Carlo Delgado

## Agradecimientos

Por su apoyo económico a la Coordinación de la Investigación Científica de la UNAM, a la Dirección General de Apoyo al Personal Académico-UNAM a través del proyecto PAPIME PE100709, al Fondo Mixto Conacyt-Baja California a través del proyecto Fondo Mixto de BC 117258 y a la Universidad Autónoma de Baja California.

## **CONTENIDO**

Curso "Nanomateriales: propiedades básicas y aplicaciones"	2
Taller introductorio: Nanociencias y Nanotecnología para Princip	oiantes 2
PROGRAMA DE ACTIVIDADES	3
PROGRAMA DETALLADO DE ACTIVIDADES	4
RESÚMENES	37
Plenaria	37
Sesión de Orales	73
Paralela 1	73
Paralela 2	89
Sesión de carteles	106
INDICE DE AUTORES	215

# Curso "Nanomateriales: propiedades básicas y aplicaciones"

Dr. Ernesto Marinero. Hitachi San Jose Research

## Taller introductorio: Nanociencias y Nanotecnología para Principiantes

- Primer módulo: Introducción, Dr. Noboru Takeuchi, CNyN-UNAM.
- Segundo módulo: Aplicaciones, Dr. Leonel Cota, CNyN-UNAM.
- Tercer módulo Aspectos económicos, políticos y legales, Dr. Giancarlo Delgado. CEIICH-UNAM
- Cuarto módulo: Visita a los laboratorios del Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Dr. Felipe Castillón, CNyN-UNAM

## PROGRAMA DE ACTIVIDADES

Lune	es 9 de Noviembre. Inscripciones 18:00=	20:00, Coctel de	e Bienvenida 20:00-22:00	
	Martes 10 de Noviembre		Miercoles 11 de 1	Noviembre
7:30-8:30	INSCRIPCIONES	8:00-8:25	P12 Dr. Giancarlo Delgad	0
			CEIICH-UNAM, D.F.	
8:30-9:00	INAUGURACION	8:25-8:50	P13 Dr. Fernando Sancén	
			Universidad Autónoma Metropolitana, Xochimilco	
9:00-9:30	P1 Dr. Tonatiuh Ramirez	8:50-9:15	P14 Dr. Antonio Paoli	
	Instituto de Biotecnología-UNAM,		Universidad Autónoma M	etropolitana, Xochimilco
	Cuernavaca			•
9:30-10:00	P2 Dr. Alexei Licea	9:15-9:40	P15 Dr. Matthew Harsh	
	CICESE, Ensenada		Arizona State University,	Tempe
10:00-10:30	P3 Dr. Pedro Serena	9:40-10:05	P16 Dr. Jorge Enrique	e Linares Salgado
	CSIC, Madrid		Facultad de Filosofía y Le	tras, UNAM, D.F.
10:30-11:00	P4 Dr. Nikola Batina	10:05-11:30	Mesa Redonda Educación	
	Universidad Autónoma		Dr. Pedro Serena CSIC, D	ra. Laura Viana CNyN,,
	Metropolitana -Iztapalapa		Dr. Miguel Méndez UDL	A., Fernando Rojas ČNyN
11:00-11:30	P5 Dr. Enrique Sámano			
	Centro de Nanociencias y			
	Nanotecnología-UNAM, Ensenada			
11:30-12:00	Coffee Break	11:30-12:00	Coffee break	
12:00-12:30	P6 Dr. Rafael Vázquez			
	Instituto de Biotecnología-UNAM,			
	Cuernavaca			
12:30-13:00	P7 Dr. Massimo Bottini			
	Burnham Institute for Medical			
	Research, La Jolla			
13:00-13:30	P8 Dra. Tessy Lopez	12:00-14:30	Paralela oral 1	Paralela Oral 2
	Universidad Autónoma			
	Metropolitana, Xochimilco	=		
13:30-14:00	P9 Dr Carlos Vera			
	Universidad Autónoma de Baja			
14.00.14.20	California, Tijuana			
14:00-14:30	P10 Dr. Leopoldo Vilchis Ramirez			
14.20 16.20	Conacyt Sesión Posters - LUNCH	14-20-16-20	LUNCH DDEAK	
14:30-16:30		14:30-16:30 16:30-17:00	LUNCH BREAK	
16:30-17:00	Transporte al Centro Estatal de las Artes	10.30-17.00	P17-Joanna McKittric University of California, S	San Diego
	Nanociencia: Arte, cultura y	17:00-17:30	P18 Gerardo Contreras	oan Diego
	diversión	17.00-17.30	FSFM-IPN, D.F.	
	diversion	17:30-18:00	P19 Manuel Quevedo	
	P11 Dr. Ivan Schuller	17.30-10.00	University of Texas-Dalla	\$
	University of California, San Diego	18:00-18:30	P20 Ernesto Marinero	
	2 10go	10.00 10.50	Hitachi Research San José	
17.00.20.00	Exhibiciones de Fotografías: Un	18:00-18:30	P21 Arturo Ayon	
17:00:20:00	Vistazo al Nanomundo y El Azul		University of Texas at Sar	n Antonio
	Maya en Cacaxtla	19:00-20:15	Mesa redonda redes en Ny	
			(CNyN), Pedro Serena (C	
	Concierto Gloria de Vivaldi,		UNAM)	,, 5
	Ensamble Fase Vocal de Pro-Música	20:15	CLAUSURA	
	Ensenada y Camerata de la			
	Licenciatura en Música de la UABC			

### PROGRAMA DETALLADO DE ACTIVIDADES

## Programa Nanomex'09 Encuentro Internacional e Interdisciplinario en Nanociencias y Nanotecnología.

### Lunes 9 de Noviembre

18:00-20:00 Inscripciones 20:00-22:00 Coctel de Bienvenida

### Martes 10 de Noviembre

7:30-8:30 Inscripciones
8:30-9:00 Inauguración
9:00-9:30 Plenaria 1
9:30-10:00 Plenaria 2
Utilización de anticuerpos de tiburon y toxinas de Conus como herramientas farmacológicas.  Alexei Licea Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada
10:00-10:30 Plenaria 3
C. Carrasco <sup>1</sup> , M. Douas <sup>2,5</sup> , R. Miranda <sup>3</sup> , M. Castellanos <sup>4</sup> , P.A. Serena <sup>5,*</sup> , J. L. Carrascosa <sup>3</sup> , M. G. Mateu <sup>4</sup> , M. I. Marqués <sup>2</sup> , P. J. de Pablo <sup>1</sup> Departamento de Física de la Materia Condensada C-III, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain.  Departamento de Física de Materiales, C-IV, Facultad de Ciencias Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

<sup>4</sup> Centro de Biología Molecular "Severo Ochoa" (CSIC-UAM), Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain.

<sup>\*</sup>Autor a contactar; e-mail: pedro.serena@icmm.csic.es

10:30-11:00
Plenaria 4
Cytomechanical properties of the cancerogenic line of cells: The AFM analysis in
nanomedicine
Nikola Batina <sup>1</sup> , Melina Tapia-Tapia <sup>1</sup> *, Carlos Lara Cruz <sup>2</sup> , Leticia González Núñez <sup>2</sup> , Eva
Ramon Gallegos <sup>3</sup> and
Pablo Damian-Matsumura <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Laboratory of Nanotechnology and Molecular Engineering, Department of Chemistry,
DCBI, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAM-I), Col.Sn Rafael
Atlixco186, Col. Vicentina, Del. Iztapalapa C.P., 09340 México D.F.
<sup>2</sup> Molecular Endocrinology Laboratory, Reproduction Biology Department, DCBS, UAM-
I
* Postgrado en Biología Experimental, CBS, UAM-I.
<sup>3</sup> Environmental Citopathology Laboratory, Morfology Department, ENCB of IPN.
<u>bani@xanum.uam.com</u>
11.00 11.20
11:00-11:30 Planaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5
Plenaria 5

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Departamento de Estructura de Macromoléculas, Centro Nacional de Biotecnología, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Campus Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, Consejo Superior de Invetigaciones Científicas, Campus de la Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain.

12:30-13:00 Plenaria 7
Carbon nanotubes as delivery systems of antisense oligonucleotides in T lymphocytes  Massimo Bottini
Burnham Institute for Medical Research, 10901 North Torrey Pines Road, La Jolla, CA 92037, USA. E-mail: <a href="mbottini@burnham.org">mbottini@burnham.org</a> ; Fax: (858) 713 6274; Tel: (858) 646 3100 (x3063).
13:00-13:30
Plenaria 8 47
Estudio en especies mayores y etapa clínica de la acción de nanopartículas NPt® en Tumores Cancerígenos en SNC de Alto Grado de Malignidad T. Lopez <sup>1,2,3</sup> , M. Alvarez <sup>2</sup> y A. Arellano <sup>2</sup>
Universidad Autonoma Metropolitana-Xochimilco. Departamento de Microbiología.
Calzada del Hueso 1100, Col. Villa Quietud, Coyoacán, C. P. 04960, México D.F,
<sup>2</sup> Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS". Laboratorio de Nanotecnología. Av. Insurgentes Sur3877, Col. La Fama, Tlalpan, 14269, México, D.F <sup>3</sup> Universidad de Tulane, Depto. De Bioingeniería Molecular, Nueva Orleans USA
13:30-14:00
Plenaria 9
Bases moleculares de la biomecánica de la membrana eritrocitaria y sus potenciales
aplicaciones biomédicas Carlos J. M. Vera Hernández M.D.
Profesor de Tiempo Completo, Facultad de Medicina y Psicología, UABC. Tijuana B.C. Project Scientist - Lecturer, Department of Bioengineering, UCSD. La Jolla, CA.
14:00-14:30
Plenaria 10
Fondo Sectorial de Hidrocarburos Dr. Leopoldo Vilchis Ramirez e Ing. Rafael Ramos Palmeros
Conacyt
14:30-16:30
Sesión de posters. Se ofrecerá un Lunch ligero.
16:30 Transporte al Centro Estatal de las Artes

## Nanociencia: Arte, cultura y diversión (en el Centro Estatal de las Artes Ensenada)

17:00-20:00 Inauguración
Plenaria 1151
Nano: ciencia, show y cine  Ivan Schuller
Department of Physics, University of California, San Diego, Estados Unidos.
Exhibiciones de Fotografías: Un vistazo al Nanomundo y El Azul Maya en Cacaxtla
Concierto
Gloria de Vivaldi
Coro Fase Vocal de Pro-Música Ensenada, Dir. Tomás Acosta, con la Camerata de la Licenciatura en Música de la UABC, Director: Ara Ghukasyan
Miércoles 11 de Noviembre 2009
8:00-8:25
Plenaria 12
Aspectos éticos, sociales y legales de la nanomedicina: una visión desde el Sur. Gian Carlo Delgado Ramos Centro de Investigaciones Interdisciplinarias en Ciencias y Humanidades, UNAM.
giandelgado@unam.mx
8:25-8:50
Plenaria 13
Ubicación de riesgos en el trabajo a nanoescala. Una visión desde la ética
Carlos Tomás Quirino Barreda ", Fernando Sancén Contreras Universidad Autónoma Metropolitana – Xochimilco, Av. Del Hueso 1100, Deleg. Coyoacán, México, D.F., Tel. 5484 7353
8:50-9:15
Plenaria 14
Nanotecnología, ética y cultura Antonio Paoli
UAM-X,
Depto. de Educación y Comunicación
9:15-9:40
Plenaria 15
Anticipatory Governance of Nanotechnology  Matthew Harsh
Center for Nanotechnology in Society. Arizona State University

9:40-10:05
Plenaria 16
Nanoética: un nuevo campo para viejos problemas sobre el riesgo tecnológico
Jorge Enrique Linares Salgado
Facultad de Filosofía y Letras, Posgrado en Filosofía de la Ciencia, UNAM
<u>lisjor@unam.mx</u>
10:05-11:30 Mesa redonda: Educación en nanociencia y Nanotecnología
MR1-160
Las (escasas) iniciativas de educación y divulgación de la nanociencia y la nanotecnología
en España
P.A. Serena
Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. Consejo Superior de Investigaciones Científicas. c/ Sor Juana Inés de la Cruz 3. Campus de Cantoblanco. 28049-Madrid España
Autor a contactar; e-mail: pedro.serena@icmm.csic.es
MR1-262
Aprendizaje. Adquisición por la práctica de una conducta duradera
Laura Viana Castrillón
Centro de Nanociencias y Nanotecnología-Universidad Nacional Autónoma de México
C. P. 22860 Ensenada, B. C., México
MR1-3
Programa integral de desarrollo regional de las nanociencias y nanotecnologia:
Ensenada como coordinador
Fernando Rojas Iñiguez 1*
<sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnologias, Universidad Nacional Autónoma de
México. Km 107 Carretera Ensenada-Tijuana
* <u>frojas@cnyn.unam.mx</u>
11:30-12:00 Coffee break
12:00-14:30 Sesión Orales Paralelas
14:30-16:30 Lunch Break
16:30-17:00
Plenaria 17
Nanostructural features as the basis for toughness in biological composites
Joanna McKittrick <sup>1,2</sup> , Po-Yu Chen <sup>2</sup> , Gustavo A. Hirata <sup>3</sup> , Ekaterina E. Novitskaya <sup>2</sup> , Steve
Lee <sup>1</sup> , Irene Chen <sup>2</sup> , and M.A. Meyers <sup>1,2</sup>
<sup>1</sup> Mechanical and Aerospace Engineering, UC San Diego, La Jolla, CA 92093 <sup>2</sup> Materials
Science and Engineering Program, UC San Diego, La Jolla, CA 92093 <sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology, UNAM, Ensenada, MX

17:00-17:30
Plenaria 18
Materiales semiconductores nanoestructurados y su aplicación en dispositivos fotovoltaicos"
Gerardo Contreras Puente
Escuela Superior de Física y Matemáticas del IPN, Edificio 9, UPALM, 07730 México
DF.
17:30-18:00
Plenaria 19
Nanotechnology opportunities in Flexible Electronics: Contacts, Dielectrics and
Semiconductos
M.A. Quevedo-Lopez "
Department of Materials Science and Engineering, University of Texas at Dallas,
Richardson, Texas, 75080: mquevedo@utdallas.edu
18:00-18:30
Plenaria 20
Nanostructured materials and devices for Information Storage and Micro-electronics
Ernesto Marinero
Hitachi San José Research Lab., Estados Unidos
18:30-19:00
Plenaria 2169
Low temperature fabrication of Barium Titanate (BTO) films on carbon fiber
employing Pulsed Laser Deposition (PLD)
G. Collins, D. Elam, R. Hackworth, R. Kotha, J. Pusateri, A. Ayon, A. Chabanov and C.
Chen
University of Texas at San Antonio
19:00-20:15
Mesa redonda
Redes en Nanociencia y Nanotecnología
Red de Nanociencias y Nanotecnología del Conacyt.
MR2-170
Red de Nanociencias y Nanotecnología del Conacyt
Sergio Fuentes Moyado
Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,
Ensenada, Baja California
MR2-271
Red de Grupos de Investigación en Nanociencia (REGINA-UNAM)
Ignacio L. Garzón
Instituto de Física, UNAM

MR2-3
La implementación de la Nanotecnología en España: de la auto-organización a las Acciones Estratégicas.  P.A. Serena <sup>1*</sup>
<sup>1</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. Consejo Superior de Investigaciones Científicas. c/ Sor Juana Inés de la Cruz 3. Campus de Cantoblanco. 28049-Madrid, España
*Autor a contactar; e-mail: pedro.serena@icmm.csic.es
20:15 Clausura
Sesiones Orales
PARALELA 1
OP1-173
Estados de Floquet en Sistemas Nanoelectromecánicos
J. Villavicencio <sup>1*</sup> , I. Maldonado <sup>2,3</sup> , E. Cota <sup>3</sup> y G. Platero <sup>4</sup>
<sup>1</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Ensenada, México. <sup>2</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, México.
<sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,
Ensenada, México.
<sup>4</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Madrid, España.
*e-mail: villavics@uabc.mx
OP1-275
Entrelazamiento térmico en un sistema de dos espines acoplados con intercambio en presencia de campo nuclear hiperfino R. Guerrero <sup>1*</sup> , F. Rojas <sup>2</sup>
Posgrado Fisica de Materiales, Centro de Investigación Científica y de Estudios Superiores de Ensenada y Universidad Autonoma de Baja Californian (UABC) Campus
Valle de las Palmas <sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnologia, UNAM
* rjgm76@hotmail.com
OP1-3
Structural properties of the adsorption of antimony and arsenic on the Si(110)-(2x3) surface.
Arely Huitzil-Tepanecatl <sup>a</sup> , Gregorio H. Cocoletzi <sup>b,c,d</sup> y Noboru Takeuchi <sup>c</sup>
<sup>a</sup> Postgrado en Física Aplicada, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, BUAP,
Apartado Postal 52, Puebla 72000, México
<sup>b</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107
Carretera Tijuana-Ensenada, Código Postal 22860, Apartado Postal 2732 Ensenada, Baja California, México,
<sup>c</sup> Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,
Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México,
dInstituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla
72570, México

OP1-4
OP1-5
OP1-6
Desarrollo de calzado innovador de modelo Nanoplata para pie diabético y personas de actividades forzadas y durante largo tiempo  N. Bogdanchikova <sup>1,*</sup> , G. Amaya Corona <sup>2</sup> , E. Pineda Martínez <sup>3</sup> , J. Catalan <sup>2</sup> , A. A. Aruela <sup>2</sup> , R. Baptista <sup>2</sup> ,  A. Salinas Ramírez <sup>4</sup> , G. Hirata <sup>2</sup> , R. Estrada Rivera <sup>5</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología UNAM Ensenada Baja California México <sup>2</sup> Universidad Autónoma de Baja California Ensenada, Baja California, México <sup>3</sup> Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo Morelia Michoacán, México <sup>4</sup> Manufacturera de Calzado San Rafael S.A. de C.V., León, Guanajuato, México <sup>5</sup> Forros Finos Zero S.A. de C.V, Guanajuato, Guanajuato, México <sup>*</sup> Autor a contactar: bogdanchikova@gmail.com
OP1-7
OP1-8
Characterization and in vivo evaluation of the antitumor activity of NPT-Cl@ nanoparticles in GBM animal model  T. López <sup>1,2,3*</sup> , M. Alvarez <sup>2</sup> , E. Martínez <sup>1,2</sup> , J. Manjarrez <sup>2a</sup> , S. Arroyo <sup>2</sup> Departamento de Atención a la Salud, Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco, México

<sup>2</sup> Laboratorio de Nanotecnología, a Laboratorio de Fisiología de la Formación Reticular, Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS", México <sup>3</sup> Department of Chemical Engineering Tulane University, USA. \* Contact autor: tessy3@prodigy.net.mx OP1-9......84 Design and characterization of novel biocatalysts for cancer treatment. T. López<sup>1,2,3\*</sup>, M. Alvarez<sup>2</sup> Departamento de Atención a la Salud, Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco, México <sup>2</sup> Laboratorio de Nanotecnología, Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS", México <sup>3</sup> Department of Chemical Engineering Tulane University, USA. \* Contact author: tessy3@prodigy.net.mx OP1-10......86 Development of inorganic nanoparticles as novel carriers for chemotherapeutic agents: biocompatibility study in major species. T. López<sup>1,2,3\*</sup>, M. Alvarez<sup>2</sup>, A. Arellano<sup>2</sup>, E. Martínez<sup>1,2</sup>, D. Molina<sup>1,2</sup>, J. Avilés<sup>1,2</sup>. Departamento de Atención a la Salud, Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco, México <sup>2</sup> Laboratorio de Nanotecnología, Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS", México <sup>3</sup> Department of Chemical Engineering Tulane University, USA. \* Contact author: tessy3@prodigy.net.mx Estudio "in vitro" de la acción de NPt®-Ligando en líneas celulares de tumores de alto grado de malignidad T. López<sup>1,2,3</sup>, M. Alvarez<sup>2</sup>, A. Rodríguez<sup>4</sup>, Miguel Galván<sup>4</sup>, M. E. Manjarrez<sup>4</sup>, J. Bustos<sup>1</sup>. Universidad Autonoma Metropolitana-Xochimilco. Departamento de Microbiología. Calzada del Hueso 1100, Col. Villa Quietud, Coyoacán, C. P. 04960, México D.F. Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS". Laboratorio de Nanotecnología. Av. Insurgentes Sur3877, Col. La Fama, Tlalpan, 14269, México, D.F. <sup>3</sup>Universidad de Tulane, Depto. De Bioingeniería Molecular, Nueva Orleans USA <sup>4</sup> Laboratorio de Virología, Instituto Nacional de Enfermedades Respiratorias, Tlalpan, México.

## PARALELA 2

OP2-1
Evolución del desarrollo de las nanociencias en México. Panorama constituido à partir de la
comparación y cruce de métodos para el monitoreo de las nanociencias
E. Robles-Belmont <sup>1,*</sup> , D. Vinck <sup>1</sup>
<sup>1</sup> PACTE PO, University of Grenoble
* Autor a contactar; e-mail: roblesbelmont@yahoo.fr
OP2-2 91
Deposition of nanostructured TiO <sub>2</sub> films by MOCVD: Effect of the experimental parameters
on morphology and crystalline phase
J. A. Galaviz Pérez <sup>1</sup> , J. R. Vargas García <sup>2</sup> , J. A. Montes de Oca Valero <sup>3</sup> , Hector J.
Dorantes Rosales <sup>4</sup>
<sup>1</sup> Dept of Metallurgical Eng., ESIQIE-IPN, México 07300 D.F., MEXICO
<sup>2</sup> Dept of Metallurgical Eng., ESIQIE-IPN, México 07300 D.F., MEXICO
<sup>3</sup> CICATA-IPN Querétaro, Querétaro MEXICO
<sup>4</sup> Dept of Metallurgical Eng., ESIQIE-IPN, México 07300 D.F., MEXICO
Corresponding author: e-mail: jgalaviz@ipn.mx
OP2 2
OP2-3 92
Obtaining of hydroxyapatite nanostructures using microwave heating J. L. Cabrera <sup>1</sup> , R. Velázquez <sup>2*</sup> , E. Rivera-Muñoz <sup>3</sup>
<sup>1</sup> CENAM- km 4.5 Carr. a los Cués, El Marqués, 76246 Querétaro.
<sup>2</sup> División de Investigación y Posgrado, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de
Querétaro. Cerro de las Campanas s/n, C.P. 76010 Querétaro, Qro., México.
<sup>3</sup> Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional Autónoma de
México, A.P. 1-1010 Querétaro, Qro., Mexico, C.P. 76000
*Autor a contactar; e-mail: rodrigo.velazquez@uaq.mx
rator a contactar, o man. <u>rounge, voiazquez (e) auq.mix</u>
OP2-4
Annealing effects on ZnO:B nanorods in Ar and O <sub>2</sub> atmospheres: a CL study
A. Susarrey-Arce <sup>1</sup> , M. Herrera-Zaldivar <sup>1,*</sup> and
J. Valenzuela-Benavides <sup>1</sup>
<sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,
Apdo. Postal 356, Ensenada, B.C. 22800, México
*Corresponding author; e-mail: zaldivar@cnyn.unam.mx
OP2-5
Synthesis of hydroxyapatite nanoparticles on silica gels
E. M. Rivera-Muñoz <sup>1*</sup> , R. Huirache-Acuña <sup>1*</sup> ,
R. Velázquez <sup>2*</sup> , G. Alonso-Núñez <sup>3*</sup> , S. Eguía-Eguía <sup>4,1*</sup>
<sup>1</sup> Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional Autónoma de
México, A.P. 1-1010 Querétaro, Qro., Mexico, C.P. 76000

<sup>2</sup> División de Investigación y Posgrado, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro. Cerro de las Campanas s/n, C.P. 76010 Querétaro, Qro., México. <sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, KM. 107, Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada, B. C. Mexico. <sup>4</sup> Facultad de Ciencias Fisico Matematicas, Centro, Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey, 66450, Mexico. Contact Author; e-mail: ... emrivera@fata.unam.mx Nanopartículas de paladio en medio líquido iónico estabilizadas con ligantes tioéter-fosfina para su aplicación en reacciones catalíticas López-Vinasco A.<sup>1\*</sup>, Martin E.<sup>1</sup>, Gómez M.<sup>2</sup>, Favier I<sup>2</sup> <sup>1</sup> Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química, UNAM, México <sup>2</sup> Laboratoire Hétérochimie Fondamentale et Appliqueé, UMR CNRS 5069, Francia \* E-mail Autor. angelamaria 1016@gmail.com Scanning tunneling microscopy of phthalocyanine molecules deposited on the iodine modified Au(111) surface: The first step towards room temperature molecular electronic devices development. Miguel Á. Venegas and Nikola Batina Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Área de Electroquímica, Universidad Autónoma Metropolitana Izta1palapa (UAM-I), México D.F. \* Autor a contactar, e-mail: mavdlc2003@yahoo.ca CL evaluation of defect structures in hydrothermally grown ZnO:Sb nanorods A. González-Carrazco<sup>1,2</sup>, M. Herrera-Zaldivar<sup>2,\*</sup>, J. Valenzuela-Benavides<sup>2</sup>, A. Escobedo-Morales<sup>3</sup> and U. Pal<sup>3</sup> <sup>1</sup>Posgrado en Física de Materiales, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada., Apartado Postal 2732, Ensenada, Baja California 22860, México. <sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 356, Ensenada, B.C. 22800, México <sup>3</sup> Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48, Puebla, Pue. 72570, México Corresponding author; e-mail: zaldivar@cnyn.unam.mx Highly active gold species supported on nanosized Ce-Al-O and Ce-Zr-Al-O mixed oxides for low temperature CO oxidation A. Simakov<sup>1</sup>, E. Smolentseva<sup>1,\*</sup>, F. Castillon<sup>1</sup>, M. Estrada<sup>2</sup>, E. Vargas<sup>3</sup>, S. Fuentes<sup>1</sup> <sup>1</sup>CNyN-Universidad Nacional Autónoma de México, Ensenada, B.C., 22860 (México) <sup>2</sup> Posgrado de Física de Materiales de CICESE, Ensenada, B.C., 22800 (México) <sup>3</sup> Posgrado en Ciencias e Ingeniería, Área Nanotecnología, UABC, Ensenada, B.C., (México)

OP2-10
Effect of proton irradiation on graphene layers  D. H. Galvan <sup>1,4</sup> , A. Posada Amarillas <sup>2</sup> , S. Mejía <sup>3</sup> ,, C. Wing <sup>5</sup> , and M. José-Yacamán <sup>4*</sup> , <sup>1</sup> On sabbatical from Centro de Nanociencias y Nanotecnología - Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, C. P. 22800, Ensenada, B. C., México. <sup>2</sup> Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apartado Postal 5-088, C. P. 83190 Hermosillo, Sonora, México. <sup>3</sup> Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Nuevo León, San Nicolas de los Garza, Nuevo León, C. P. 66451, México. <sup>4</sup> Department of Chemical Engineering and International Center for Nanotechnology & Advanced Materials, University of Texas at Austin, Austin, TX, 78712, USA.  Donald@cnyn.unam.mx
OP2-11105
Singular grain boundaries around <0001> hexagonal semiconductor films: theoretical prediction and experimental validation
A. Ponce <sup>1,a</sup> , D. Romeu <sup>1</sup> , and P. Ruterana <sup>3</sup> <sup>1</sup> Laboratory for electron microscopy. Centro de Investigación en Química Avanzada.
Blvd. Enrique Reyna Hermosillo, 140. Saltillo (Coahuila). 25253. Mexico
<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364,
México D.F., Mexico 01000.
<sup>3</sup> CIMPAP UMR 6252 CNRS-ENSCAEN-CEA-UCBN, 6, Boulevard du Maréchal Juin, 14050 Caen Cedex, France
a email: corresponding aponce@ciqa.mx
SESION DE CARTELES
TÓPICO I. NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA EN BIOLOGÍA Y MEDICINA
CBM-1106
Epidemiologia Molecular del Virus de Inmunodeficiencia Humana: Explorando aplicaciones
Nanobiotecnologicas con partículas de plata
J. Chavez <sup>1*</sup> , R. C. Baptista Rosas <sup>2</sup> , N. Bogdanchikova <sup>3</sup> <sup>1</sup> Universidad Autónoma de Baja California. Facultad de Medicina, Tijuana, México
<sup>2</sup> Universidad Autónoma de Baja California. Escuela de Ciencias de la Salud, Ensenada,
México
<sup>3</sup> Universidad Nacional Autónoma de México. Centro de Nanociencias y Nanotecnología,
Ensenada, México * Autor a contactar: rom11mex@yahoo.com.mx
Autor a contactar. form finex@yanoo.com.mx
CBM-2
Ecotoxicidad de CeO <sub>2</sub> nanoparticulado, en artemias salinas.
L. De la Cruz <sup>1, 2</sup> , E. Chavira <sup>1</sup> , A. Nieto <sup>3</sup> , C. Quintanar <sup>4</sup> , S. Torres <sup>5</sup> <sup>1</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México,
A. P. 70-360, 04510 México, D. F., MÉXICO.
<sup>2</sup> Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D. F., MÉXICO

<sup>3</sup> Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, A. P. 70-213, 04510 México, D. F., MÉXICO.

<sup>4</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, 04510 México, D. F., MÉXICO.

<sup>5</sup> Facultad de Ingeniería Química, Campus de Ingenierías y Ciencias Exactas, Universidad Autónoma de Yucatán, 97203 Mérida, Yucatán, MÉXICO.

e-mail: dualinlu@yahoo.com.mx

Obtención de polimerosomas de ciclofosfamida mediante la técnica de microfluídos

Quirino-Barreda<sup>1</sup> C T, Noguez-Méndez<sup>1</sup> N A, Cruz-Ruiz<sup>1</sup> G, Chávez-Castellanos<sup>2</sup> A E, Rojas-Oviedo<sup>1</sup> I.

- <sup>1</sup> Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco. México, D.F. Departamento de Sistemas Biológicos. Calzada del Hueso 1100, Col. Villa Quietud. Delegación Coyoacán. C.P. 04960.
- <sup>2</sup> Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F. Facultad de Ingeniería, Circuito Exterior, Delegación Coyoacán.

Autor a contactar. e-mail: <a href="mailto:cquirino@correo.xoc.uam.mx">cquirino@correo.xoc.uam.mx</a>. Dr. Carlos Tomás Quirino Barreda.

Release Profiles of Aquasomes Loaded with Indomethacin

Rojas-Oviedo<sup>1</sup> I , López-Torres<sup>1</sup> A, Reyes-Gasca<sup>2</sup> J, Quirino-Barreda<sup>1</sup> C T., García-García<sup>2</sup> R.

- <sup>1</sup> Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco. México D.F. Departamento de Sistemas Biológicos. Calzada del Hueso 1100 Col Villa Quietud CP. 04960 Delegación Coyoacán.
- <sup>2</sup> Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F. Instituto de Física, Circuito Exterior, Delegación Coyoacán.

Contact Autor: e-mail: irma19@correo.xoc.uam.mx. Dra. Irma Rojas Oviedo.

### TÓPICO II. ENERGÍA Y MEDIO AMBIENTE

Estudio diagnóstico para la evaluación estacional de los niveles de material particulado fino y ultrafino en la cuenca atmosférica de Tijuana, B.C.

E. Castillo-Quiñones<sup>1,\*</sup>, G. Rodriguez-Ventura<sup>1</sup>, P. J. E. Quintana<sup>2</sup>, N. Bogdanchikova<sup>3</sup>

<sup>1</sup>UABC, Tijuana, México

<sup>2</sup>Universidad Estatal de San Diego, CA, EE. UU.

<sup>3</sup>CNyN-UNAM, 22800, Ensenada, México

\* Autor a contactar: castillo@uabc.mx; jaem78@hotmail.com

CEMA-6
CEMA-7
CEMA-8
TÓPICO III. NANOMATERIALES
CNM-9
CNM-10

CNM-11
AFM, STS and XPS study of PVD-grown C <sub>60</sub> fullerene films
O. Amelines-Sarria <sup>1,*</sup> , P. C. dos Santos Claro <sup>2</sup> , A. A. Rubert <sup>2</sup> , G. A. Benitez <sup>2</sup> , P. L.
Schilardi <sup>2</sup> , B. Blum <sup>2</sup> , V. A. Basiuk <sup>1</sup> , R. C. Salvarezza <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito
Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;
<sup>2</sup> Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, CCT La Plata
CONICET y Departamento de Química - UNLP, calle 64 y Dg-113, B1904DPI La Plata
Buenos Aires, Argentina
* Author for correspondence; e-mail: <u>oscar.amelines@nucleares.unam.mx</u>
Author for correspondence, e-mail. <u>oscar.ametines@nucleares.unam.mx</u>
CNM-12
Cílculos de primeros princípios de la estructura atómica de la adsorción de Al sobre GaN
R. García Díaz <sup>a</sup> , Gregorio H. Cocoletzi <sup>a,b,c</sup> y Noboru Takeuchi <sup>c</sup>
<sup>a</sup> Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla
72570, México.
<sup>b</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 10'
Carretera Tijuana-Ensenada, Código Postal 22860, Apartado Postal 2732 Ensenada, Baja
California, México.
<sup>c</sup> Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México
Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México.
CNM-13
Nanostructured surface of Ni22%atSi alloy irradiated with nickel ions of 3.66 MeV a
650°C.
C. Camacho <sup>1, 2, *</sup> , A. García Bórquez <sup>1</sup> , G. Rueda <sup>1</sup>
A. Ávila García <sup>3</sup> , A. Juanico <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Departamento de Ciencia de Materiales, IPN., ESFM, México, D.F., 07738
<sup>2</sup> División de Ingeniería Industrial y de Sistemas, UPVM, Estado de México, 54910
<sup>3</sup> Departamento de Ingeniería Eléctrica, CINVESTAV, México, D.F., 07340
* ccamacho@upvm.edu.mx
coamaono (og ap vini.caa.mx
CNM-14
Caracterización de propiedades mecánicas de películas delgadas de nitruro de tántalo
sintetizadas por ablación láser
Karla Paola Valdez Núñez <sup>1*</sup> , W. De La Cruz <sup>2</sup> , J. Muñoz Saldaña <sup>3</sup>
<sup>1</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada (CICESE).
<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.
<sup>3</sup> Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, campus Querétaro.
*kvaldez@cnyn.unam.mx
CND 4.15
CNM-15
LDL/HDL on Au (111) substrate: AFM Visualization
Aristeo Segura a,b and Nikola Batina b
a) Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma Benito Juárez de Oaxaca,
Av Univ S/N Col 5 Señores C.P. 68120 Oaxaca México ass@aristeosegura.com.mx

bla 107 aja
30
32 ing
33 gía B2
34 Fe <sub>r</sub>
1 1 3 1 3 1 3 1 3 1 3 1 3 1 3 1 3 1 3 1

Hidalgo, Unidad Universitaria, Km 4.5 Carretera Pachuca-Tulancingo, C.P. 42184 Pachuca-Hidalgo, México. <sup>2</sup>División de Ingeniería en Informática, Universidad Politécnica del Valle de México, Av. Mexiquense, Tultitlan, Estado de México, CP 54910, México <sup>3</sup> Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, México D.F., C.P 04510, México. \* Corresponding authors. E-mail addresses: pandiyan@servidor.unam.mx (T. Pandiyan). Tel: (01) 52-55-5622-34-99 Reflectancia óptica de películas delgadas de nitruro de aluminio depositadas por ablación F. Chalé-Lara<sup>1,4</sup>, M.H. Farias<sup>2</sup>, C. Huerta-Escamilla<sup>3</sup>, M. Xiao<sup>2</sup> <sup>1</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, C.P. 22800, México. <sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 365, Ensenada CP 22800, Baja California, México. <sup>3</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Km. 103 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22800, Ensenada, Baja California, México. <sup>4</sup>CICATA-IPN Unidad Altamira, Km. 14.5 Carretera. Tampico-Puerto Industrial CP 89600, Altamira, Tamps, México. \*fchale@cnyn.unam.mx: Influencia de las condiciones de crecimiento sobre las propiedades de reflectancia óptica en películas delgadas de nitruro de berilio depositadas por ablación láser F. Chalé-Lara<sup>1,4</sup>, M. H. Farías<sup>2</sup>, C. Huerta-Escamilla<sup>3</sup>, M. Xiao<sup>2</sup> <sup>1</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, C.P. 22800, México. <sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 365, Ensenada CP 22800, Baja California, México. <sup>3</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Km. 103 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22800, Ensenada, Baja California, México. <sup>4</sup>CICATA-IPN Unidad Altamira, Km. 14.5 Carretera. Tampico-Puerto Industrial CP 89600, Altamira, Tamps, México. fchale@cnyn.unam.mx: Propiedades electrónicas del óxido de nitruro de boro: un estudio teórico computacional E. Chigo Anota<sup>1</sup>, H. Hernández-Cocoletzi<sup>1,\*</sup>, M. Salazar Villanueva<sup>2</sup> <sup>1</sup> Facultad de Ingeniería Química, BUAP, Avenida San Claudio y 18 sur s/n CU San Manuel, Edificio 149 Puebla 72570, México <sup>2</sup> Facultad de Ingeniería, BUAP, Avenida San Claudio y 18 sur s/n CU San Manuel, Edificio 149 Puebla 72570, México Autor a contactar; e-mail: heribert@sirio.ifuap.buap.mx.

<sup>1</sup> Investigaciones Químicas y ciencias de la Tierra, Universidad Autónoma del Estado de

CNM-24
Estudio teórico de la adsorción de InN sobre la superficie (0001) de GaN H. Hernández-Cocoletzi <sup>1,*</sup> , Gregorio H. Cocoletzi <sup>2</sup> , Noboru Takeuchi <sup>3</sup> <sup>1</sup> Facultad de Ingeniería Química, BUAP, Avenida San Claudio y 18 sur s/n CU San Manuel, Edificio 149 Puebla 72570, México
<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla 72570, México
<sup>3</sup> Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México.  * Autor a contactar; e-mail: heribert@sirio.ifuap.buap.mx.
CNM-25
Estudio de las Características Estructurales y Electrónicas del Nitruro de Zinc Fabian Herrera Rodríguez <sup>1</sup> , J. M. Quintana Melgosa, <sup>1</sup> Ma. Guadalupe Moreno Armenta <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Universidad Autónoma de Baja California; Fac. de Ciencias Químicas e Ingeniería; Tijuana,
B. C. México <sup>1</sup> <sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM, Ensenada, B. C. México <sup>2</sup> Autor a contactar: fabianherrera117@hotmail.com
CNM-26
Partículas bi-metálicas Au-M (M=Al, Ru, Co, Rh, Ir, Pd) interactuando con O <sub>2</sub> y CO. M. Ugalde <sup>1</sup> , Reyna Caballero <sup>2</sup> , E. Chavira <sup>1</sup> , Carlos Quintanar <sup>2*</sup> .
<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, AP 70-360, 04510 México, D. F., MEXICO.
<sup>2</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, 04510 México, D. F., MEXICO.
* Carlos Quintanar cqs@fciencias.unam.mx
CNM-27
Síntesis y caracterización de polvos nanoestructurados de ZnO obtenidos en medio
polialcohólico para aplicación en sensores MA. Flores-González <sup>1</sup> , M. Villanueva-Ibáñez <sup>1</sup> , MA. Hernández-Pérez <sup>2</sup> , H. J. Dorantes-
Rosales <sup>2</sup> , P. Rivera-Arzola <sup>1</sup>
<sup>1</sup> Laboratorio de Nanotecnología y Bioelectromagnetismo Aplicado- Universidad Politécnica de Pachuca, Pachuca-Cd. Sahagún Km 20, ex-Hda. de Santa Bárbara 43830,
Zempoala, Hidalgo. México. <sup>2</sup> Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico
Nacional, CP 07738, Mexico D.F., México.  * Autor a contactar: e-mail: flores@upp.edu.mx

CNM-32
Biosíntesis de nanopartículas de platino mediante el hongo filamentoso Neurospora Crassa.
Moreno-Velásquez, S. D. <sup>1</sup> , Vilchis-Nestor A. R. <sup>2</sup> , Avalos-Borja, M. <sup>3</sup> y Castro-Longoria, E. <sup>4</sup>
Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad de Sonora (DICTUS), Universidad de Sonora. <sup>2</sup> Centro de Investigación en Química Sustentable, Universidad Autónoma del Estado de México (CIQS-UAEM), México. <sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). <sup>4</sup> Centro de Investigación Científicamente y Educación Superior de Ensenada, CICESE. Autor para correspondencia. ecastro@cicese.mx
CNM-33
Nano and micro reoriented domains and their relation with the crystal structure in the new ferroelectric Fe Zn B O Cl Boracite
S. Ulloa-Godínez <sup>1,5</sup> , A. Barrera <sup>2</sup> , I. Rosales <sup>3</sup> , L. Bucio <sup>3</sup> , F. F. Castillón <sup>4</sup> , M.H. Farias <sup>4</sup> <sup>1</sup> Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingeniería, Universidad de Guadalajara, Laboratorio de Materiales Avanzados del Departamento de Electrónica. Av. Revolución No.1500, Módulo O, Planta baja, S.R. C.P. 44840, Guadalajara, Jalisco, México. <sup>2</sup> Centro Universitario de la Ciénega, Universidad de Guadalajara, Laboratorio de Materiales.
Av. Universidad No. 1115, Colonia Linda Vista, C.P. 47840, Ocotlán, Jalisco, México. <sup>3</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, C.P. 01000 México, D. F., México.
<sup>4</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 356, C.P. 22800, Ensenada, Baja California, México. <sup>5</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California, Blvd. Benito Juarez s/n col. Insurgentes, Mexicali, Baja California, México. Autor a contactar; e-mail: <a href="mailto:jcampa@daad-alumni.de">jcampa@daad-alumni.de</a> .
CNM-34
Determinación de la capacidad de biosíntesis de nanopartículas de cobre y paladio mediante el hongo filamentoso <i>Neurospora crassa</i> .
Acedo-Valdez, M. R. <sup>1</sup> , Vilchis-Nestor A. R. <sup>2</sup> , Avalos-Borja, M. <sup>3</sup> y Castro-Longoria, E. <sup>4</sup> <sup>1</sup> Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad de Sonora (DICTUS), Universidad de Sonora. <sup>2</sup> Centro de Investigación en Química Sustentable, Universidad Autónoma del Estado de México (CIQS-UAEM), México. <sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). <sup>4</sup> Centro de Investigación Científicamente y Educación Superior de Ensenada, CICESE. Autor para correspondencia. ecastro@cicese.mx
CNM-35
Cúmulos de oro y plata como catalizadores de crecimiento epitaxial de GaN por CVD. Gregorio Guadalupe Carbajal Arízaga <sup>1,*</sup> , Karina Viridiana Chávez Hernández <sup>1</sup> , Rafael García Gutierrez <sup>2</sup> , Oscar Edel Contreras López <sup>1</sup>
<sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología. Universidad Nacional Autónoma de México. Apdo. Postal 356, C.P. 22800. Ensenada, Baja California, México.

<sup>2</sup> Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Hermosillo, Sonora. * Autor a contactar; e-mail: gregoriocarbajal@yahoo.com.mx
CNM-36
Desarrollo de un reactor de lecho fluidizado bidireccional para el procesamiento de polvos. G. Soto*, H. Tiznad Universidad Nacional Autónoma de México * e-mail: gerardo@cnyn.unam.mx.
CNM-37
CNM-38
A new red-emitting La <sub>1-x</sub> Pr <sub>x</sub> Sr <sub>2</sub> AlO <sub>5</sub> phosphor prepared by combustion synthesis C. E. Rodríguez-García <sup>1</sup> , E. M. Tejeda <sup>2</sup> , F.F. Castillón <sup>2</sup> and G.A. Hirata <sup>2</sup> <sup>1</sup> Physics of Materials Graduate Program, CICESE-UNAM, Km 107 Carretera Tijuana-Ensenada, No. 3918, Zona Playitas Ensenada, B. C., 22860 México. <sup>2</sup> Center of Nanoscience and Nanotechnology UNAM. Km 107 Carretera Tijuana-Ensenada. Ensenada, B. C., México 22860  * ceduardo@cnyn.unam.mx
CNM-39
Síntesis y Funcionalización de Nanopartículas de Oro como Medio Suministrador de Fármacos  M.C. Ramírez-Camacho <sup>1,*</sup> , A. Susarrey-Arce <sup>2</sup> , N. Bogdanchikova <sup>2</sup> , M. Avalos <sup>2</sup> <sup>1</sup> Maestria en Ciencias e Ingeniería con especialidad en Nanotecnología-UABC, Km 107 carretera Tijuana-Ensenada, 22800, Ensenada, México <sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM Km 107 carretera Tijuana-Ensenada, 22800, Ensenada, México  *M.C. Ramírez-Camacho; maycecilia07@gmail.com
CNM-40
García Gutierrez <sup>2</sup> , Oscar Edel Contreras López <sup>1</sup> <sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología. Universidad Nacional Autónoma de México.  Apdo. Postal 356, C.P. 22800. Ensenada, Baja California, México. <sup>2</sup> Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Hermosillo, Sonora.  * Autor a contactar: e-mail: gregoriocarbajal@vahoo.com.mx

CNM-41
Optical properties of ZnO nanoparticles on the porous structure of mordenites and ZSM-5
zeolites
A. Susarrey-Arce <sup>1,*</sup> , V. Petranovskii <sup>1,*</sup> , M. Herrera-Zaldívar <sup>1</sup> , M. A. Hernández-Espinosa <sup>2</sup> , R. Portillo <sup>3</sup> and W. De La Cruz <sup>1</sup>
Espinosa <sup>2</sup> , R. Portillo <sup>3</sup> and W. De La Cruz <sup>1</sup>
<sup>1</sup> CNYN-UNAM, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada, B.C.,
México
<sup>2</sup> Departamento de Investigación en Zeolitas y Posgrado de Ciencias Ambientales del
Instituto de Ciencias de la Universidad Autónoma de Puebla, México
<sup>3</sup> Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México
* Corresponding Authors. E-mails: arturosusarce@yahoo.com.mx, vitalii@cnyn.unam.mx
CDD 4.40
CNM-42
Síntesis y caracterización de películas delgadas de nitruro de cobre con plata
I. Ponce-Cazares <sup>1,2,*</sup> , W. De La Cruz <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Posgrado en Física de Materiales, Centro de Investigación Científica y Educación
Superior de Ensenada, Km 107carretera Tijuana-Ensenada, A.P. 360, C.P. 22860,
Ensenada B.C., México.
<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM, Km 107carretera Tijuana-Ensenada,
A.P. 356,C.P. 22860, Ensenada B.C., México.
*iponce@cnyn.una.mx
CNM-43
Synthesis and characterization of inorganic/polymer multilayers
S.R. Payán <sup>1</sup> , PY. Chen <sup>2</sup> , M.A. Meyers <sup>2</sup> , J. McKittrick <sup>2</sup> and G.A. Hirata <sup>3</sup>
<sup>1</sup> Materials Science Engineering Program-UNAM, Ensenada, México 22860
<sup>2</sup> Mechanical and Aerospace Engineering, UC-San Diego, La Jolla, CA 92093-0411
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44
<ul> <li><sup>3</sup>Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860</li> <li>*spayan@cnyn.unam.mx</li> <li>CNM-44</li></ul>
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44
<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860 *spayan@cnyn.unam.mx  CNM-44

CNM-45
Biosíntesis de nanopartículas bimetálicas de Au/Ag, asistida por el hongo Neurospora crassa
Vilchis-Nestor A.R. <sup>1</sup> , Castro-Longoria E. <sup>2</sup> , Avalos-Borja M <sup>3</sup>
<sup>1</sup> Centro de Investigación en Química Sustentable, Universidad Autónoma del Estado de
México (CIQS-UAEM), México. <sup>2</sup> Departamento de Microbiología, Centro de
Investigación Científica y de Educación superior de Ensenada (CICESE), Ensenada,
México. <sup>3</sup> Departmento de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional
Autónoma de México (CNyN-UNAM), México. arvilchisn@uaemex.mx
CNM-46
Gold and silver metal clusters and nanoparticles stabilization supported in Mordenite type of
zeolites
I. Tuzovskaya <sup>1, 2</sup> , A. Susarrey-Arce <sup>1</sup> , N. Bogdanchikova <sup>1,*</sup> , A. Pestryakov <sup>2</sup> , V. Gurin <sup>3</sup> , M. H. Farías <sup>1</sup> and M. Avalos <sup>1</sup>
<sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM, Km. 107 Carretera Tijuana-
Ensenada, CP.22800, Ensenada, Baja California, México.
<sup>2</sup> Tomsk Polytechnic University, Lenin ave. 30, Tomsk 634034 Russia.
<sup>3</sup> Physico-Chemical Research Institute, BSU, Minsk, Belarus.
<sup>4</sup> Department of Chemistry, Moskow State University, Moskow 119899 Russian
Federation.
*Corresponding Author: nina@cnyn.unam.mx
CNM-47
Síntesis solvotérmica y caracterización de nanoalambres de WO <sub>x</sub>
M. Cardoza <sup>1*</sup> , S. Sepúlveda <sup>2</sup> , A. Olivas <sup>1</sup>
<sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,
C.P. 22800. Ensenada B.C., México.
<sup>2</sup> Centro de Innovación, Investigación y Desarrollo en Ingeniería y Tecnología,
Universidad Autónoma de Nuevo León, C.P. 66600, Apodaca, Nuevo León, México.
*E-mail: mcardoza@cnyn.unam.mx
CNM-48171
Primeras etapas del crecimiento de nanopartículas de cobalto depositadas sobre Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
(0001) estudiadas a partir del análisis de la forma de la parte inelástica de un pico XPS.
C. Gallardo-Vega <sup>1,*</sup> , L. Cota-Araiza <sup>2</sup> , S. Tougaard <sup>3</sup> ,
W. De La Cruz <sup>2</sup>
Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada (CICESE), Km
107 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada B.C., México.
<sup>2</sup> Centro de Ciencias de la Materia Condensada, Universidad Nacional Autónoma de
México, Km 107 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada B.C., México.
Department of Physics, University of Odense, DK-5230 Odense M, Denmark.
* Carlos Alberto Gallardo Vega; e-mail: gallardo@cnyn.unam.mx

CNM-49
Síntesis y Caracterización teórico experimental de nanopartículas de CeO <sub>2</sub>
Jorge Barreto1, M. Ugalde2, Eduardo Muñoz Picone1, Reyna Caballero3, Carlos
Quintanar3*, E. Chavira2, Ernesto Marinero4.
<sup>1</sup> Instituto de Físicas Universidad Nacional Autónoma de México, AP 20-364, 01000
México, D. F., MEXICO.
<sup>2</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México,
AP 70-360, 04510 México, D. F., MEXICO.
<sup>3</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria,
04510 México, D. F., MEXICO.
<sup>4</sup> Hitachi San Jose Research Center, 3403 Yerba Buena Road, San Jose, CA 95135, USA.
* Carlos Quintanar cqs@fciencias.unam.mx
CNM-50
Micro-nanoláminas de oxido de molibdeno sintetizadas por el método CSVT
A. Martinez-Diaz <sup>1,*</sup> , F. Chávez <sup>2</sup> , P. Zaca-Morán <sup>2</sup> , E. Sánchez-Mora <sup>1</sup> , O. Goiz <sup>3</sup> , R. H. López <sup>4</sup> , C. Felipe <sup>5,*</sup>
López <sup>4</sup> , C. Felipe <sup>5.*</sup>
<sup>1</sup> Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y
Blvd. 18 Sur Col. San Manuel, 72579, Puebla, México.
<sup>2</sup> Departamento de Fisicoquímica de Materiales, ICUAP, Benemérta Universidad
Autónoma de Puebla, 72000, Puebla, México
<sup>3</sup> Departamento de Ingeniería Eléctrica, CINVESTAV, Instituto Politécnico Nacional,
07000, D. F., México
<sup>4</sup> Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco 917, 5700 San
Luis, Argentina.
<sup>5</sup> Departamento de Biociencias e Ingeniería, CIIEMAD, Instituto Politécnico Nacional,
07340, D. F., México.
* A. Martinez-Diaz; e-mail: <a href="mailto:sega_nada@yahoo.com.mx">sega_nada@yahoo.com.mx</a>
* C. Felipe; e-mail: <u>cfelipe@ipn.mx</u>
CNM-51
Síntesis de nano-hidroxiapatita sobre biomateriales de uso ortopédico
Mónica Isabel Soto Tapiz <sup>1,*</sup> , Mónica Carrillo Beltrán <sup>1</sup> , Benjamín Valdez Salas <sup>2</sup> , Roumen
Zlatev <sup>3</sup>
<sup>1</sup> Laboratorio de Procesos Biotecnológicos y Biopelículas, Instituto de Ingeniería,
Universidad Autónoma de Baja California-Campus Mexicali.
<sup>2</sup> Laboratorio de Corrosión y Materiales, Instituto de Ingeniería, Universidad Autónoma de
Baja California-Campus Mexicali.
<sup>3</sup> Laboratorio de Electroquímica Aplicada, Instituto de Ingeniería, Universidad Autónoma
de Baja California-Campus Mexicali.

moni\_tita@hotmail.com (estudiante de doctorado del Programa MYDCI).

CNM-52
Síntesis y caracterización de un nanocompuesto ácido orgánico/Montmorilonita. Su
aplicación como catalizador heterogéneo.
M. Vargas-Rodríguez <sup>1,*</sup> , R. Miranda <sup>1</sup> , J.A. Chávez <sup>2</sup> , M. Salmón <sup>3</sup>
<sup>1</sup> Depto de Ciencias Químicas, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán-UNAM.
Campo No. 1, Santa María Las Torres. Cuautitlán Izcalli. C.P. 54740. Estado de México.
México
<sup>2</sup> Instituto de Química, UNAM. Circuito Exterior. Ciudad Universitaria. Coyoacán 04510.
México D.F. México
<sup>3</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM. Circuito Exterior. Ciudad
Universitaria. Coyoacán 04510. México D.F. México.
*e-mail: ym_vargas@yahoo.com.mx
CNM-53
Estudio de sistemas bimetálicos Cu/Zn-Mordenitas con propiedades catalíticas para la
descomposición de NO <sub>x</sub> .  Viridiana Evangelista H. <sup>1,*</sup> , Vitalii Petranovskii <sup>2,*</sup> , Inocente Rodríguez Iznaga <sup>3</sup> , Andrey
Simakov <sup>2</sup> , Felipe Castillón Barraza <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Posgrado en Física de Materiales, CICESE, Ensenada, B.C., México.
<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM, Ensenada, BC, México <sup>3</sup> Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana,
Cuba
* Autores a contactar; e-mail: vevangel@cnyn.unam.mx; vitalii@cnyn.unam.mx
CNM-54 181
CNM-54
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup>
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química,
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> a) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> a) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.  c) Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> a) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.  c) Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> a) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.  c) Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> a) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.  c) Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx  CNM-55
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> a) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.  c) Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx  CNM-55
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> a) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.  c) Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx  CNM-55
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> <sup>a)</sup> Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. <sup>*)</sup> Posgrado en Biología Experimental <sup>b)</sup> Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F. <sup>c)</sup> Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx  CNM-55
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> a) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F.  *) Posgrado en Biología Experimental  b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.  c) Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx  CNM-55
Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.  Acosta García Ma. Cristina <sup>a,*</sup> , Avalos Pérez Angélica <sup>a</sup> , Ramírez Mario Alberto <sup>a</sup> , Franco Martha <sup>b</sup> , Pérez Gravas Héctor <sup>b</sup> , Cadena Méndez Miguel <sup>c</sup> and Batina Nikola <sup>a</sup> <sup>a)</sup> Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. <sup>*)</sup> Posgrado en Biología Experimental <sup>b)</sup> Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F. <sup>c)</sup> Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx  CNM-55

CNM-56
Copper-silver bimetallic system on natural clinoptilolite: thermal reduction of exchanged
Cu <sup>2+</sup> and Ag <sup>+</sup>
Inocente Rodríguez Iznaga <sup>1</sup> , Felipe Castillón Barraza <sup>2</sup> , Beatriz Concepción Rosabal <sup>1</sup>
Vitalii Petranovskii <sup>2,*</sup>
<sup>1</sup> Instituto de Ciencias y Tecnología de Materiales (IMRE) – Universidad de La Habana
Zapata y G, s/n La Habana 10400. Cuba
<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología (CNyN) – Universidad Nacional Autónoma
de México. Ensenada, B.C. – México
* Autor a contactar; e-mail: vitalii@cnyn.unam.mx
CNM-57
Películas Delgadas de Óxidos Metálicos como Sustratos en el Crecimiento de Nanotubos de
Carbono
A. M. Valenzuela-Muñiz <sup>1</sup> , Y. Verde-Gómez <sup>2</sup> , G. Alonso-Núñez <sup>3</sup> , M. Miki-Yoshida <sup>1,*</sup>
<sup>1</sup> Centro de Investigación en Materiales Avanzados S. C., Miguel de Cervantes 120
Chihuahua
Chih., 31109, México.
<sup>2</sup> Instituto Tecnológico de Cancún, Kabah Km 3, Cancún, Quintana Roo, 77500, México.
<sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México
Ensenada, Baja California, 22860, México
* M. Miki-Yoshida; mario.miki@cimav.edu.mx, Tel. +52 (614) 439 1114
GDD 4.70
CNM-58
Ensamble molecular de NTC con éter corona para el desarrollo de sensores químicos J.P. Camarena <sup>1</sup> , J.H. Espinoza Gómez <sup>1</sup> , R. Somanathan <sup>2</sup> , G. Alonso <sup>3</sup> , H. Tiznado <sup>3</sup> , E
Vélez-López <sup>1</sup> , M. Avalos <sup>3</sup> , M.A. Martínez-López <sup>1</sup> , E. Rogel-Hernández <sup>1*</sup>
<sup>1</sup> Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California.
<sup>2</sup> Centro de Graduados e Investigación del Instituto Tecnológico de Tijuana.
<sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM.
Eduardo Rogel Hernández. Correo electrónico: <b>eduardorogel60@uabc.mx</b>
CNM-59
Fullerene thin films functionalized by 1,5-diaminonaphthalene: Preparation and properties
E. Martínez-Loran <sup>1,2</sup> , E. Alvarez-Zauco <sup>2,*</sup> , V. A. Basiuk <sup>2</sup> , E. V. Basiuk <sup>3</sup> and M. Bizarro
Sordo <sup>4</sup>
<sup>1</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito
<sup>1</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;
<ul> <li>Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;</li> <li>Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F.</li> </ul>
<ul> <li>Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;</li> <li>Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F. Mexico;</li> </ul>
<ul> <li>Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;</li> <li>Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F. Mexico;</li> <li>Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM, Circuito Exterior C.U.</li> </ul>
<ul> <li>Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;</li> <li>Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F. Mexico;</li> <li>Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM, Circuito Exterior C.U. 04510 México, D.F., Mexico;</li> </ul>
<ul> <li>Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;</li> <li>Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F. Mexico;</li> <li>Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM, Circuito Exterior C.U. 04510 México, D.F., Mexico;</li> <li>Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510</li> </ul>
<ul> <li>Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;</li> <li>Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F. Mexico;</li> <li>Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM, Circuito Exterior C.U. 04510 México, D.F., Mexico;</li> </ul>

CNM-60
Noncovalent interaction of meso-tetraphenylporphine with C <sub>60</sub> fullerene as studied by
several DFT methods
V. A. Basiuk*, Y. Kolokoltsev and O. Amelines-Sarria
Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito
Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;
* Author for correspondence; e-mail: <u>basiuk@nucleares.unam.mx</u>
CNM-61
Self-assembly of <i>meso</i> -tetraphenylporphines on carbon nanomaterials
M. Bassiouk and V. A. Basiuk*
Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito
Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico
* Author for correspondence; e-mail: basiuk@nucleares.unam.mx
- Indiana to the control of the cont
CNM-62
AFM and STM studies of non covalent conjugates of human serum albumin deposited onto
carbon nanotubes.
F. F. Contreras-Torres, A. Rodríguez-Galván, E. V. Basiuk, V. A. Basiuk
Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma
de México (UNAM), Circuito exterior S/N Ciudad Universitaria, A. P. 70-186, C. P.
04510 México D.F., Phone: +52(55)5622-8602 ext. 1150. Fax +52(55)5622-8651, e-
mail: flavioc@nucleares.unam.mx
CNM-63
Solvent-Free Functionalization of Multi-Walled Carbon Nanotubes with Aliphatic Amines
O. E. Ochoa-Olmos <sup>1</sup> , V. Meza-Laguna <sup>2</sup> , F. F. Contreras-Torres <sup>1</sup> , E. Alvarez-Zauco <sup>2</sup> , I.
Puente-Lee <sup>3</sup> , E. V. Basiuk <sup>1,*</sup> , and V. A. Basiuk <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional
Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, 04510 México
D.F., Mexico;
<sup>2</sup> Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C. U., 04510 México D.F.,
Mexico; <sup>3</sup> Facultad de Química, UNAM, Circuito de la Investigación Científica, C. U.,
04510 México D.F., Mexico
* Author for correspondence; e-mail: elenagd@servidor.unam.mx
ruthor for correspondence, e-mail: cichagu@servidor.unam.mx
CNM-64
Optical and Photoelectrical Studies of Gold Nanoparticles-Decorated C60 Films.
N. L. Dmitruk1, O. Yu. Borkovskaya1, S. V. Mamykin1, D. O. Naumenko1, V. Meza-
Laguna2, E. V. Basiuk (Golovataya-Dzhymbeeva)3*
<sup>1</sup> Institute for Physics of Semiconductors, National Academy of Sciences of Ukraine, 45
Nauki Prospect, Kyiv 03028, Ukraine
<sup>2</sup> Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM),
Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, A. P. 70-186, C. P. 04510 México D.F.

Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional JNAM), Circuito exterior S/N Ciudad Universitaria, A. P. 70-186, .F., Phone: +52(55)5622-8602 ext. 1150. Fax +52(55)5622-servidor.unam.mx
197
-
c devices  v* Sate Hamana C <sup>2</sup> Mantin on Dain A 1
niversidad Autónoma de Raia California
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
· ·
oxide nanoparticles supported in carbon nanotubes for the
<u>urcjunaro(a)adoc.mx</u>
partículas de TiO <sub>2</sub> . Estudio experimental y teórico.
pista MtyAeropuerto Km.10, PIIT, Apodaca, N. L., México C.P.
0 / : 1 (0(01)
mav.edu.mx
203
$z^2$
enada
as UABC, Maestría y Doctorado en Ciencias e Ingeniería: área
<u>n</u> <u>alejandro@uabc.mx</u>
Servidor unam.mx

CNM-69
Calculation of the dielectric function of zigzag(6,0) boron nitride nanotubes with adsorption
of molecular hydrogen
R. A. Vazquez-Nava <sup>1,*</sup> , N. Arzate <sup>1</sup> and J. E. Mejía <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Centro de Investigaciones en Optica A. C., Loma del Bosque 115, Col. Lomas del Campestre, León, Guanajuato, México.
<sup>2</sup> Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara, México
* Dr. Raúl Vázquez; e-mail: alfonso@cio.mx
CNM-70
Electroluminiscencia en silicio pororoso
F. Severiano-Carrillo <sup>1</sup> , G. G. Salgado <sup>2</sup> , A. Méndez-Blas <sup>1</sup> , J.M. Gracia y Jimenez <sup>1</sup> , E. Sánchez-Mora <sup>1</sup>
Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48, 205
C.P. 72570, Puebla, Pue., México.
Instituto de Semiconductores, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, C.P. 72570.
CNM-71
Termoluminiscencia de ZnO Obtenido por Tratamiento Térmico de ZnS Sintetizado
Químicamente
J. L. Iriqui-Razcón <sup>1</sup> , C. Cruz-Vázquez <sup>1</sup> , R. Bernal <sup>2,*</sup>
<sup>1</sup> Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales de la Universidad de Sonora,
Apartado Postal 130, Hermosillo, Sonora 83000 México
<sup>2</sup> Departamento de Investigación en Física de la Universidad de Sonora, Apartado Postal
5-088, Hermosillo, Sonora 83190 México
* jorgeiriqui@gimmunison.com
CNM-72 207
Propiedades Termoluminiscentes de Nanofósforos de ZnO Sinterizados a Diferentes
Temperaturas
H. A. Borbón-Nuñez <sup>1</sup> *, C. Cruz-Vázquez <sup>1</sup> , F. Brown <sup>1</sup> , R. Bernal <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales de la Universidad de Sonora,
Apdo. postal 130, Hermosillo, Sonora 83000 México.
<sup>2</sup> Departamento de Investigación en Física de la Universidad de Sonora, Apdo. postal 5-088, Hermosillo, Sonora 83190 México.
* hugoborbon@gimmunison.com
nugovoroon(a/gminiumson.com
CNM-73
Propiedades ópticas obtenidas por reflectancia especular de películas de ZrO2 crecidas por
PLD
L.O. Prieto-López <sup>1,*</sup> , W. De La Cruz <sup>1</sup> , J. Ferrer <sup>2</sup> , F. Yubero <sup>2</sup>
<sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,
Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22860, México.
<sup>2</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (CSIC-Univ. Sevilla). Avda. Américo Vespucio 49. 41092 Sevilla (España).
* Autor a contactar: e-mail: lizzy.prieto@gmail.com

CNM-74
Respuesta Óptica de una Estructura de Multicapas de Fibonacci con Velocidad de Fase
Negativa
X. I. Saldaña <sup>1*</sup> , G. H. Cocoletzi <sup>1,2,3</sup> <sup>1</sup> Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, México. <sup>2</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, Código Postal 22860, Apartado Postal 2732 Ensenada, Baja California, México. <sup>3</sup> Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México.  * xochitl@sirio.ifuap.buap.mx
CNM-75
Anclaje de dislocaciones de tornillo en GaN nanoestructurado
F. Ruiz-Zepeda <sup>1</sup> , O. Contreras <sup>2,*</sup> , A. Dadgar <sup>3</sup> y A. Krost <sup>3</sup>
<sup>1</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, 22860 Ensenada B.C., México.
<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo.
Postal 356, C.P. 22800, Ensenada B.C., México.
<sup>3</sup> Otto-von-Guericke Universität-Magdeburg, Institut für Experimentelle Physik, Fakultät für
Naturwissenschaften, Postfach 4120, 39016 Magdeburg, Germany.  * Autor a contactar; e-mail: edel@cnyn.unam.mx.
CNM-76
Theoretical study of photo-electronic properties of organic donor-acceptor molecules Erika Ivonne López-Martínez <sup>1</sup> , Luz María Rodríguez-Valdez <sup>2</sup> , Norma Flores-Holguín <sup>1</sup> , Alfredo Márquez-Lucero <sup>1</sup> y Daniel Glossman-Mitnik <sup>1</sup>
<sup>1</sup> Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Grupo de modelado molecular y Nanomateriales (NANOCOSMO). Miguel de Cervantes 120. Complejo Industrial Chihuahua. Chihuahua, Chih. 31109. México.
<sup>2</sup> Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Chihuahua. Ave. Escorza y Venustiano Carranza S/N. Chihuahua, Chih. C.P. 31000.
CNM-77212
Effects of impurity scattering on the quantized conductance of semiconductor nanowires with magnetic field
Rubén C. Villarreal S. <sup>1,2,*</sup> , Francisco Mireles <sup>2</sup> , Ernesto Marinero <sup>3</sup>
<ul> <li>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, CICESE</li> <li>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, CNYN-UNAM, Ensenada BC.</li> <li>Hitachi Global Storage Technologies, San José California, EUA.</li> </ul>
* rcesar@cnyn.unam.mx

CNM-78
Resonant and non-resonant microwave absorption study of the Verwey transition in Fe <sub>3</sub> O
nanoparticles
H. Montiel <sup>1</sup> *, G. Alvarez <sup>2*</sup> , M. Castellanos <sup>3</sup> , R. Zamorano <sup>4</sup>
<sup>1</sup> Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico de la Universidad Naciona Autónoma de México, 04510 DF, México.
<sup>2</sup> Departamento de Materiales Metálicos y Cerámicos, Instituto de Investigaciones en Materiales
de la Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 DF, México.
<sup>3</sup> Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria 04510
DF, México.
<sup>4</sup> Departamento de Ciencias de los Materiales, Instituto Politécnico Nacional, U.P.A.L.M. Edificio 9, Av. Instituto Politécnico Nacional S/N, 07738 DF, México.
* herlinda_m@yahoo.com, memodin@yahoo.com
TÓPICO III. EDUCACIÓN Y DIVULGACIÓN DE LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA
CEDM-79
Easy to make paper models of carbon nanostructures
R. Carrera-Flores, G. Frías-Villegas, D. Venegas-Suarez-Peredo and V. A. Basiuk*
Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito
Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;
* Author for correspondence; e-mail: <a href="mailto:basiuk@nucleares.unam.mx">basiuk@nucleares.unam.mx</a>
1

### **RESÚMENES**

### **PLENARIAS**

### **P1**

### El uso de nanotubos de la proteína recombinante VP6 de rotavirus como templado multifucnional para la síntesis de nanobiometales funcionalizados con metales

Germán Plascencia-Villa <sup>1</sup>, José M. Saniger <sup>2</sup>, Jorge A. Ascencio <sup>3</sup>, Laura A. Palomares <sup>1\*</sup> and Octavio T. Ramírez <sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Medicina Molecular y Bioprocesos, Instituto de Biotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, AP 510-3, CP 62250, Cuernavaca, Morelos, México. <sup>2</sup> Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM. <sup>3</sup> Grupo de Materiales, Instituto de Ciencias Físicas, UNAM \*tonatiuh@ibt.unam.mx. Tel (52) 777 329-1646; Fax (52) 777 313 8811

Las estructuras virales tienen un gran potencial en nanobiotecnología debido a sus características estructurales, entre ellas tamaño y forma constantes y predefinidos. En particular, los ensamblajes virales pueden funcionar como moldes o templados para la construcción de nuevos nanomateriales altamente organizados. En este trabajo, mostramos por primera vez que nanotubos formados por la proteína recombinante VP6 de rotavirus pueden ser usados como andamios para la síntesis de nanocompuestos híbridos. VP6 de rotavirus, producida mediante el sistema de expresión células de insecto-baculovirus, se ensambló in vivo como nanotubos de varios micrómetros de longitud y distintos diámetros en la escala nanométrica. Los nanotubos así producidos fueron funcionalizados con Ag, Au, Pt, y Pd mediante reducción química en medio acuoso, con reductor fuerte (borohidruro de sodio) o débil (citrato de sodio), obteniéndose nanocompuestos que fueron caracterizados por microscopía electrónica de transmisión (TEM), TEM de alta resolución (HRTEM) acoplado con espectroscopía de dispersión de rayos-X (EDS), dispersión de luz dinámica y su resonancia de plasmón característico. La superficie exterior de los nanotubos de VP6 mostró una afinidad intrínseca a la deposición de metales, lo que permitió la síntesis in situ Además, el uso de tales estructuras proteicas recombinantes de nanopartículas. preensambladas resultó en nanomateriales integrados altamente organizados. Mediante la manipulación de las condiciones de reacción fue posible obtener diferentes coberturas y características de los metales depositados. Las observaciones por TEM revelaron que se obtuvo una cobertura continua formada por una película electrodensa delgada al usar citrato de sodio como reductor, o una cobertura con nanopartículas metálicas discretas con diámetros de 2 a 9 nm al usar borohidruro de sodio como reductor y tiempos de reacción cortos. El empleo de borohidruro de sodio y tiempos largos de reacción resultó en la coalescencia de las nanopartículas y la formación de una cubierta metálica gruesa. Mediciones por HRTEM-EDS confirmaron la identidad y composición de las nanopartículas metálicas. Comparado con otros soportes virales no recombinantes usados hasta ahora, los nanotubos de VP6 recombinantes empleados en este trabajo poseen ventajas importantes, incluyendo una dimensión axial mayor, una estructura dinámica multifuncional y hueca, y la posibilidad de ser producidos de forma masiva por bioprocesos seguros y eficientes. Tales características confieren a los nanobiomateriales obtenidos en este trabajo un potencial importante en diversas aplicaciones nanotecnológicas.

# Utilización de anticuerpos de tiburon y toxinas de Conus como herramientas farmacológicas.

#### Alexei Licea

Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada

Como es bien sabido, varios herramientas moleculares que se utilizan en la actualidad, tienen su origen en moleculas aisladas de organismos marinos. Los ejemplos más conocidos son agentes antivirales, así como proteinas fluorecentes (proteina verde fluorecente).

En nuestro grupo de trabajo, nos hemos enfocado a el asilamiento actividad moléculas marinas con farmacológica. Hasta el momento hemos logrado moleculas capacidad aislar caracterizar con de regular división celular en células cancer de mama prostata, y capacidad antituberculosis moleculas tanto humana como bovina, con niveles regular los de glucosa sangre, agentes antiinflamatorios, en neutralizantes de venenos, asi como agentes para facilitar el diagnóstico de tuberculosis y VIH, entre otros.

# Hacia el control de las propiedades mecánicas de cápsidas víricas

C. Carrasco<sup>1</sup>, M. Douas<sup>2,5</sup>, R. Miranda<sup>3</sup>, M. Castellanos<sup>4</sup>, P.A. Serena<sup>5,\*</sup>, J. L. Carrascosa<sup>3</sup>, M. G. Mateu<sup>4</sup>, M. I. Marqués<sup>2</sup>, P. J. de Pablo. De Pablo.

<sup>1</sup> Departamento de Física de la Materia Condensada C-III, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain.

<sup>2</sup> Departamento de Física de Materiales, C-IV, Facultad de Ciencias Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

<sup>3</sup> Departamento de Estructura de Macromoléculas, Centro Nacional de Biotecnología, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Campus Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain

<sup>4</sup> Centro de Biología Molecular "Severo Ochoa" (CSIC-UAM), Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain.

<sup>5</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, Consejo Superior de Invetigaciones Científicas, Campus de la Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain.

\* Autor a contactar; e-mail: pedro.serena@icmm.csic.es

Palabras clave: Virus, cápsides, nanocontenedores, capilaridad

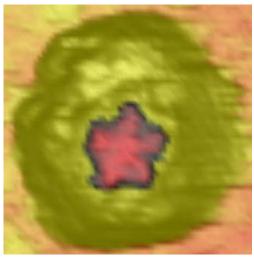
Las técnicas SPM permiten la exploración en líquidos y al aire de materiales y procesos biológicos a escala nanométrica [1]. El estudio de virus ha despertado gran interés en nanotecnología ya que estas entidades, a mitad de camino entre la materia inerte y la vida, son auténticas 'nanomáquinas', capaces de realizar decenas de funciones a partir de la información que almacenan en un pequeño volumen. Además, diferentes tipos de virus se han propuesto para la fabricación de nuevas baterías ión-litio [2], nanohilos metálicos y semiconductores [3], etc. El uso de virus como elementos para la nanofabricación del futuro requiere la caracterización y el control de sus diferentes propiedades, incluidas las mecánicas.

El estudio de propiedades mecánicas de virus (tanto vacíos como llenos de ácido nucleico) ha sido abordado mediante herramientas SPM [4,5] que permiten su caracterización topográfica (ver Figura 1a) a la vez que se miden localmente las constantes elásticas a partir de las curvas fuerza-distancia. Con dicha información se puede establecer la correlación entre las diferentes geometrías de la cápside y las propiedades elásticas medidas, y establecer el papel que juega la orientación del virus, su llenado con ARN o ADN, etc. Estas observaciones son corroboradas mediante diferentes simulaciones basadas en cálculos de elementos finitos.

En este trabajo nos centramos en el estudio de las propiedades mecánicas de los virus MVM (minute virus of mice) y  $\Phi$ 29, y de su comportamiento ante la repentina desecación de los mismos [6]. Se ha encontrado que las cápsidas víricas liberan el ácido nucleico de su interior en los procesos de desecado [7]. Las cápsides vacias del virus  $\Phi$ 29 suelen colapsar durante dicho proceso de desecación (Figura 1b), indicando la formación de nanomeniscos de agua

en el interior de las cápsidas. Estos nano-mensicos provocan intensas fuerzas capilares compresivas [8,9] que pueden provocar el colapso del virus.

En este trabajo también se ilustrará como se induce el colapso de cápsidas MVM usando otros líquidos y como se puede modificar la constante elástica de los virus MVM usando glutaraldehido. Este tipo de experimentos permite alcanzar gran control sobre las propiedades mecánicas de los virus.



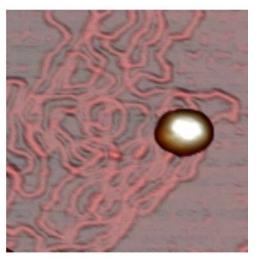


Figura 1. (a) Imagen de un virus MVM con ADN en su interior en condiciones de buffer. (b) Imagen del virus MVM, rodeado del ADN liberado durante el proceso de desecación.

**Agradecimientos.** Programa NANOOBJETOS (S-0505/MAT/0303) de la CAM y FISI2006-11170-C2-01 del MICINN.

#### Referencias

- [1] F. Moreno-Herrero et al., Appl. Phys. Lett. 81, 2620 (2002); I. Horcas et al., Rev. Sci. Instrum. 78, 013705 (2007).
- [2] Y. Jung Lee, et al., Science 324, 1051 (2009).
- [3] Ch. Mao et al., Science 303, 213 217 (2004).
- [4] C. Carrasco et al. PNAS 103, 13706 (2006).
- [5] I.L. Ivanovska et al. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 101, 7600 (2004).
- [6] C. Carrasco et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 105, 4150 (2008)
- [7] C. Carrasco, et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 106, 5475 (2009).
- [8] J. Y. Jang et al., Phys. Rev. Lett. 92, 085504 (2004).
- [9] Special issue on Nanoconfined water. J. Phys. Condens. Matter. 16, S5257 (2004).

# Cytomechanical properties of the cancerogenic line of cells: The AFM analysis in nanomedicine

Nikola Batina<sup>1</sup>, Melina Tapia-Tapia<sup>1</sup>\*, Carlos Lara Cruz<sup>2</sup>, Leticia González Núñez<sup>2</sup>, Eva Ramon Gallegos<sup>3</sup> and Pablo Damian-Matsumura<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratory of Nanotechnology and Molecular Engineering, Department of Chemistry, DCBI, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAM-I), Col.Sn Rafael Atlixco186, Col.Vicentina, Del. Iztapalapa C.P., 09340 México D.F.

<sup>2</sup> Molecular Endocrinology Laboratory, Reproduction Biology Department, DCBS, UAM-I \* Postgrado en Biología Experimental, CBS, UAM-I.

**Keywords:** cancer, AFM, adhesion force, nanomedicine.

Nowadays, investigation in the cancer biology, demands new methods to provide complementary informations at the cellular and molecular level. Recently, it has been shown that the cells can also change the rigidity quite considerably during progress of disease [1]. Thus cellular (membrane) biomechanical properties, become an important factor relating to the function, adherence and invasion of cancer cells [2]. We use the nanotechnology methods and tools, such as the atomic force microscopy (AFM), to investigate morphological and nanomechanical properties of three cancer cell lines (i)HeLa (human cervical cancer), (ii) MCF-7 (human breast cancer) and (iii) MDA-MB-231 (human breast metastatic cancer).

The AFM images and the force curves for cellular material were obtained and analyzed using a Multimode Nanoscope IIIa system (Veeco Instrument Inc., Santa Barbara, CA, USA). Mechanical properties like roughness surface (RMS $_{\rm [Rq]}$ ), adhesion (F $_{\rm Adh}$ ) and attraction (F $_{\rm Att}$ ) forces, between the tip and the cell surface (membrane) were studied in details in order to compare changes between a metastatic and non metastatic cancerogenic cells. Ethanol train fixed cells were imaged in contact and tapping mode, in air. To measure the adhesion and attraction force quantitatively, we recorder force curves related to the AFM tip deflection as a function of the sample height. Roughness was estimated on images with 2  $\mu m$  x  $2\mu m$  area. Analysis was performed in the zone of the cell nuclei [3,4].

We found that Hela and MCF-7 show stronger interaction force than MDA-MB-231 cells. The adhesion forces recorded for HeLa ( $F_{Adh-HeLa}$ = 0.655nN /  $F_{Att-HeLa}$ = 0.06nN) and MCF-7 cells ( $F_{Adh-MCF-7}$ = 0.311nN /  $F_{Att-MCF-7}$ = 0.028nN) are seven times bigger than adhesion force of MDA-MB-231 ( $F_{Adh-MDA-MB-231}$ = 0.066nN /  $F_{Att-MDA-MB-231}$ = 0.002nN). Also in the same comparison the attraction force of MDA-MB-231 is twenty-two times lower than two mentioned above. Our results suggest on decrease of activity of specific cell-surface adhesion proteins in the MDA-MB-231 plasmatic membrane [5]. This observation was supported by  $RMS_{[Rq]}$  analysis, when it was observed that MDA-MB-231 surface ( $RMS_{[Rq]}$ =

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Environmental Citopathology Laboratory, Morfology Department, ENCB of IPN. <u>bani@xanum.uam.com</u>

84.72nm) poses higher roughness than MCF-7 and HeLa  $(RMS_{[Rq]-MCF-7}=49.51 / RMS_{[Rq]-HeLa}=42.91nm)$ , respectively.

This is in accordance with results of some very recent biochemical studies, which show that the tumor and normal cells are 33% more adhesive compared to the metastatic forms [6,7]. Therefore a significant difference between metastatic and non metastatic cytomechanical characteristics, found in our study, are not surprise. Additional information related to the cancer cell migration, motility and the invasion and progress of the metastasis process, are found, too, and will be presented during the presentation as example how AFM and nanotechnology tools could give new insides into cellular processes and nanomedicine.

**Acknowledgements:** This study was supported by SEP-CONACYT Project (CB-2006-1-61242):"Nanotecnología para medicina y biología: estudio de caracterización de células por AFM y STM" and UAM multidisciplinary investigation Project 13/2007: "Análisis nanométrico de proteínas de la membrana plasmática de células de cáncer, caracterización del receptor erbB2". Acknowledge to CONACYT for the scholarship.

#### Refences:

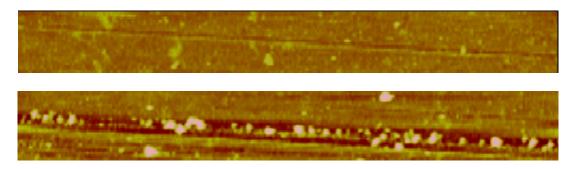
- [1] T. Berdyeva, C.D. Woodworth and I. Sokolov, Ultramicroscopy. **102**, 189 (2005).
- [2] S.E. Cross, Y. Jin, J. Rao and J.K. Gimzewski, Nature Nanotechnology. 2, 780 (2007).
- [3] M. Tapia-Tapia, MsC thesis, ENCB-IPN, (2005).
- [4] M. Tapia-Tapia, E. Ramon Gallegos and N. Batina, Respyn-Revista Salud Publica y Nutricion, 7, 1 (2007).
- [5] S.E. Cross, Y.S. Jin, J. Tondre, R. Wong, J.Y. Rao and J.K. Gimzewski, Nanotechnology, 19, 384003 (2008).
- [6] I. Sokolov AFM in Cancer Cell Research, Chapt.1: Cancer Nanotechnology by American Scientific Publishers, 1 (2007).
- [7] S. Suresh, Nature Nanotechnology.2, 748 (2007).

### Síntesis de nanoalambres usando ADN como mediador

M. J. Oviedo y E. C. Samano

Centro de Nanociencias y Nanotecnología-Universidad Nacional Autónoma de México A. P. 2681, C. P. 22800 Ensenada, B. C., México

Hay un interés creciente en nanotecnología por buscar formas alternativas a los métodos convencionales de miniaturización (top-down methods) usados en la actualidad en la fabricación de dispositivos electrónicos. Una de estas alternativas para diseñar dispositivos a escala nanométrica se basa en métodos de amplificación (bottom-up methods) usando ADN. El bloque de construcción de un dispositivo es un nanoalambre conductor o semiconductor. Este trabajo muestra un esquema basado en litografía molecular de secuencia especifica utilizando el ADN como andamio para sintetizar un alambre de plata con un diámetro de unos cuantos nanómetros. A grandes rasgos, la litografía molecular se basó en las siguientes etapas. Primeramente, se polimerizó una cadena sencilla de ADN-lambda formando un filamento de nucleoproteína con la proteína *RecA*, después se recombinó el filamento sobre una cadena doble de ADN previamente derivada con aldehído en una secuencia homóloga específica. Para después metalizar el ADN recombinado usando una solución de AgNO<sub>3</sub> para formar nanoalambres continuos de plata a lo largo de la doble cadena de ADN-lambda.



**Fig.** Imágenes de AFM a una escala horizontal de 5μm de una fibra de ADN-lambda antes y después del proceso de metalización.

### P6 Nanobiocatálisis

Rafael Vazquez Duhalt Instituto de Biotecnología UNAM

El impresionante progreso de la nanotecnología y de la biotecnología en los últimos años ha provocado un rápido crecimiento de la nanobiotecnología. Hasta hace dos décadas, estas dos pujantes áreas del conocimiento se desarrollaban casi sin ninguna interacción, sin embargo recientemente el número de interacciones sinérgicas se han incrementado produciendo avances innovadores. La nanobiocatálisis es quizás el mejor ejemplo de esta sinergia. Por un lado, la biocatálisis cuenta con una larga experiencia en inmovilización de enzimas sobre una diversidad de materiales y por numerosos métodos. Por otro lado, la nanotecnología ha producido una variedad de materiales de tamaños controlados a la escala nanométrica y con propiedades específicas.

Al principio de la interacción, las enzimas fueron inmovilizadas en materiales nanoestructurados por métodos convencionales, como el simple atrapamiento o el enlace covalente. Las nanoestructuras utilizadas pueden ser nanoesferas, nanofibras, nanotubos o materiales nanoporosos. Estas preparaciones presentan una mayor superficie de reacción, mayor carga de enzima, y en muchos casos mayor estabilidad que las enzimas convencionalmente inmovilizadas. Sin embargo, actualmente se explora aprovechar otras propiedades de los materiales nanoestructurados, además de la del tamaño. El perfecto control sobre el tamaño de poro, la conductividad eléctrica, el magnetismo, la hidrofobicidad o hidrofilicidad, son características de los nanomateriales que han revolucionado la biocatálisis. Actualmente se pretende tener biocatalizadores "inteligentes" que puedan responder a estímulos externos para cambiar sus propiedades físicas o catalíticas.

En esta presentación se realizará un sobrevuelo de las técnicas de preparación de biocatalizadores nanoestructurados, sus propiedades catalíticas, de estabilidad y del aprovechamiento de las propiedades del nanomaterial en la catálisis. También se discutirá una lista de aplicaciones potenciales de la nanobiocatalisis, desde la transformación en medios no convencionales hasta la fabricación de celdas enzimáticas de combustible.

# Carbon nanotubes as delivery systems of antisense oligonucleotides in T lymphocytes

#### Massimo Bottini

Burnham Institute for Medical Research, 10901 North Torrey Pines Road, La Jolla, CA 92037, USA. E-mail: <a href="mbottini@burnham.org">mbottini@burnham.org</a>; Fax: (858) 713 6274; Tel: (858) 646 3100 (x3063).

**Introduction:** Among recently nanotechnology-introduced materials, carbon nanotubes (NTs) have been intensely investigated because of such extraordinary physicochemical properties as high aspect ratios (length to diameter ratio), light weight, high mechanical strength, high electrical conductivity, high thermal conductivity, metallic or semi-metallic behavior, and high surface area. These combined properties make NTs unique materials with the potential for nanomedical applications. In particular, PEGylated NTs (PNTs) have been used to target a specific cell type and integrin-positive tumors in mice, and exhibited long blood circulation times, low uptake by the reticuloendothelial system and no in vivo toxicity. These results suggest that PNTs can be developed as far more effective delivery systems than pristine NTs and other nanomaterials. **Objective:** The present work focuses on the generation of a PNT-based delivery system for antisense oligonucleotides (ASOs). Methods: NTs were functionalized through adsorption of phospholipids terminated by activated PEG chains. A first-generation ASO against human PTPN22 (a negative regulator of TCR signaling) was designed, synthesized and loaded onto the PNT-based nanoassemblies through a cleavable disulfide bond. Results: The biomimetic nanoassemblies were composed by PEGylated individual/very small bundles of carbon nanotubes having an average length and a standard deviation of 151 nm and 43 nm, respectively. The nanoassemblies were stably dispersed under physiological conditions. The cleavable nature of the disulfide bond in ASO-conjugated PNTs was confirmed by functionalization of PNT with a single-stranded DNA analog and incubation with dithiothreitol followed by agarose gel electrophoresis. The protein expression knock-down in T lymphocytes was evaluated by western blot and real time PCR. Conclusions: This work suggests that PNTs are excellent scaffolds for the fabrication of delivery systems able to achieve a specific cytoplasmic effect.

### Estudio en especies mayores y etapa clínica de la acción de nanopartículas NPt® en Tumores Cancerígenos en SNC de Alto Grado de Malignidad

T. Lopez <sup>1,2,3</sup>, M. Alvarez <sup>2</sup> y A. Arellano<sup>2</sup>

Universidad Autonoma Metropolitana-Xochimilco. Departamento de Microbiología. Calzada del Hueso 1100, Col. Villa Quietud, Coyoacán, C. P. 04960, México D.F,
 Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS". Laboratorio de Nanotecnología. Av. Insurgentes Sur3877, Col. La Fama, Tlalpan, 14269, México, D.F
 Universidad de Tulane, Depto. De Bioingeniería Molecular, Nueva Orleans USA

Se observa el efecto antineoplásico de nanopartículas **NPt**® en Glioblastoma Multiforme (GBM) de pacientes del Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS". Después de varios años de investigación "in vitro" e "in vivo", recientemente las nanopartículas para cáncer muestran no ser tóxicas y totalmente biocompatibles con tejido cerebral y con la membrana neuronal, la cual les permite el paso a través de los canales. Dentro de la membrana se desplazan hasta el núcleo para efectuar una reacción de rompimiento de los enlaces carbono-nitrógeno y carbono-carbono del ADN.

En los estudios *in-vitro* e *in-vivo* se observa la respuesta de las células tumorales con inhibición del crecimiento de las mismas. En modelos animales hay una alta eficacia de la suspensión de **NPt**® infiltrada, que como consecuencia presenta una disminución del crecimiento de tumores inducidos con respecto a los controles. De igual manera en modelos de GBM intracraneal en ratas se demostró una inhibición del crecimiento del tumor y tolerancia clínica y por laboratorio de la administración del fármaco de manera local. La administración de la suspensión de **NPt**®, así como la asociación de las mismas con la neurona, fueron bien toleradas tras su administración usando cirugía estereotáctica en cerebro de ratas Wistar y perros. No hubo reacción inflamatoria intraparenquimatosa ni en el espacio subaracnoideo.

El presente estudio se está llevando a cabo en pacientes con diagnóstico de lesiones gliales de alto grado de malignidad que han sido tratados mediante tratamiento convencional (cirugía, quimioterapia y radioterapia) al cual no han respondido y quienes ya no son candidatos a ser tratados con los recursos conocidos. El procedimiento quirúrgico consiste en la aplicación directa de una suspensión de **NPt®** en el lecho tumoral y en el interior de la lesión tumoral usando un neuronavegador. Se pretende valorar el volumen tumoral, la sobrevida de los pacientes, así como la presencia de complicaciones locales y sistémicas, por clínica, laboratorio e imagen.

### Bases moleculares de la biomecánica de la membrana eritrocitaria y sus potenciales aplicaciones biomédicas

Carlos J. M. Vera Hernández M.D. .

Profesor de Tiempo Completo, Facultad de Medicina y Psicología, UABC. Tijuana B.C. Project Scientist - Lecturer, Department of Bioengineering, UCSD. La Jolla, CA.

La membrana del glóbulo rojo (eritrocito) es la más sencilla de las membranas biológicas. Dicha membrana tiene un papel fundamental en el transporte e intercambio de gases y proporciona al eritrocito la flexibilidad y resistencia mecánica que le permiten sobrevivir su paso a través de la microcirculación, esto a pesar de que carece de núcleo y organelos que permitan la reparación o reemplazo de sus estructuras dañadas. La membrana eritrocitaria ha sido optimizada por miles de años de evolución para desarrollar su función, su paradigma de construcción hace uso de características propias de los denominados "materiales inteligentes", tales como autoensamble, autoreparación, organización jerárquica, y modulación funcional. El estudio detallado de su estructura molecular, su manipulación mediante técnicas de biotecnología, la caracterización de sus propiedades biofísicas, y el modelaje matemático son herramientas fundamentales para el entendimiento de esta compleja estructura biológica. En este trabajo se presentan los avances logrados en el estudio del denominado "complejo de unión", el cual define la topología de construcción del esqueleto de membrana eritrocitaria, en particular respecto al papel de la tropomodulina eritrocitaria (E-Tmod), la tropomiosina humana isoforma 5 (hTM5), la espectrina y la actina. Es muy probable que el entendimiento de su estructura y función contribuya significativamente al desarrollo de una nueva generación de materiales biomiméticos basados en nanotecnología con múltiples aplicaciones biomédicas, entre las que se encuentran: biosensores, liposomas reforzados, y agentes de transporte y liberación controlada de fármacos.

#### Referencias Clave:

- 1. Vera, C., Sood, A., Gao, K.-M., Yee, L., Lin, J. and Sung, L.A. (2000) Tropomodulin-binding site mapped to residues 7-14 at the N-terminal heptad repeats of tropomyosin isoform 5. Archives of Biochemistry and Biophysics 378,16-24.
- 2. Chu, X., Chen, J., Reedy, M.C., Vera, C., Sung, Paul K.L., and Sung, L. A. (2003) E-Tmod capping of actin filaments at the slow-growing end is required to establish mouse embryonic circulation. American Journal of Physiology: Heart and Circulation Physiology 284: H1827-38.
- 3. Sung, L.A., and Vera, C. (2003) Protofilament and Hexagon: A three-dimensional mechanical model for the junctional complex in the erythrocyte membrane skeleton. Annals of Biomedical Engineering, Vol. 31:1314-1326.
- 4. Vera, C., Skelton, R., Bossens, F., and Sung A. (2005) 3-D Nano-mechanics of an Erythrocyte Junctional Complex in Equibiaxial and Anisotropic Deformations. Annals of Biomedical Engineering 33(10): 1387-404.

- 5. Vera, C., Lao, J., Hamelberg, D., and Sung, L.A. (2005) Mapping the Tropomyosin Isoform 5 Binding Site on Human Erythrocyte Tropomodulin: Further Insights into E-Tmod/TM5 Interaction. Archives of Biochemistry and Biophysics 444(2): 130-8.
- 6. Zhu, Q., Vera, C., Asaro, R., and Sung, A. (2007) A Hybrid Model for Erythrocyte Membrane: A Single Unit of Protein Network Coupled with Lipid Bilayer. Biophysical Journal 93(2): 386-400.

### Fondo Sectorial de Hidrocarburos

Dr. Leopoldo Vilchis Ramirez e Ing. Rafael Ramos Palmeros *Conacyt* 

## Nano: ciencia, show y cine

### Ivan Schuller

Department of Physics, University of California, San Diego, Estados Unidos.

Esta conferencia va a ser una mezcla entre ciencia, show y cine ilustrando la historia e importantes conceptos en Nanociencia.

# Aspectos éticos, sociales y legales de la nanomedicina: una visión desde el Sur.

### Gian Carlo Delgado Ramos

Centro de Investigaciones Interdisciplinarias en Ciencias y Humanidades, UNAM. giandelgado@unam.mx

Palabras clave: Nanomedicina, ética, aspectos legales, sociedad, México.

El avance de la nanotecnología y la relativa madurez de la biotecnología ha inspirado la especulación sobre posibles y/o eventuales avances de la medicina en el siglo XXI. La nanotecnología, y más precisamente, las tecnologías convergentes, prometen tener un fuerte potencial, pero también importantes y complejas implicaciones de diversa índole dado que se estima que se revolucionará todo el sector salud mediante la introducción de procesos de frontera e instrumentación para diagnosis, tratamiento y rehabilitación, entre otras aplicaciones de segundo orden. Tal vez de lo que más llama la atención está la posibilidad de "mejorar" o de "rediseñar" la condición humana, una especulación que ya ha sido objeto de extensa revisión por parte de sociólogos, filósofos y éticos de la ciencia y la tecnología, políticos, etcétera. Esta presentación evalúa la posibilidad de implicaciones positivas y negativas de la nanomedicina al discutir, desde una perspectiva propia de los países del Sur, algunos aspectos éticos, sociales y legales, así como algunos de los impactos o limitaciones que traería consigo su desarrollo y uso en países como México o, dicho de otro modo, se valoran los diversos aspectos relacionados a la introducción de la nanomedicina en el contexto social, económico y político del país.

#### Referencias

- 1. Bouchard, Raymond. *Bio-Systemics Synthesis*. Science and Technology Foresight Pilot Project. Report No. 4. Canadian National Research Council. Canada. June, 2003.
- 2. Delgado, Gian Carlo. *Guerra por lo Invisible: negocio, implicaciones y riesgos de la nanotecnología.* Ceiich, UNAM. Mexico, 2008.
- 3. European Commission. European Technology Platform on NanoMedicine: Vision Paper and Basis for a Strategic Research Agenda for NanoMedicine. Bélgica, septiembre de 2005.
- 4. Funtowicz, Silvio & Ravetz, Jerome. *Uncertainty and Quality in Science Policy*. Kluwer Academic. London, United Kingdom., 1990.
- 5. ISO. Nanotechnologies Health and Safety Practices in occupational Settings Relevant to Nanotechnologies. Switzerland. October 1<sup>st</sup>, 2008
- 6. Nordmann, Alfred (rapporteur). *Converging Technologies Shaping the Future of European Societies*. European Commission. Brussels, 2004.

- 7. Parker, Lyn. Foreword to: Zonneveld, Leo (ed). *Reshaping the Human Condition*. *Exploring Human Enhancement*. Rethenau Instituut. The Haugue. The Nederlands, 2008.
- 8. Ravetz, Jerome. *Scientific Knowledge and its Social Problems*. Oxford University Press. New York, United States., 1971.
- 9. Roco, Mihail & Bainbridge, William (eds). *Converging technologies for improving human performance*. National Science Foundation. Arlington, United States, 2002.
- 10. Schummer, Joachim. "Societal and Ethical Implications of Nanotechnology: meanings, interest groups and social dynamics". *Techné: Research in Philosophy and Technology*. Vol. 8. No. 2. Spring, 2005.
- 11. Strand, Roger & Nydal, Rune. "Nanoética Buena Nanotecnología buena". *Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria de Nanociencia y Nanotecnología.* Vol. 1. No. 1. UNAM. Mexico. November, 2008.

### Ubicación de riesgos en el trabajo a nanoescala. Una visión desde la ética

Carlos Tomás Quirino Barreda ", Fernando Sancén Contreras Universidad Autónoma Metropolitana – Xochimilco, Av. Del Hueso 1100, Deleg. Coyoacán, México, D.F., Tel. 5484 7353.

Email: cquirino@correo.xoc.uam.mx. calahorramex@yahoo.com.mx.

La investigación y el desarrollo (I&D) de la Ciencia y la tecnología (CyT) a nanoescala ha generado nuevas expectativas, gracias a los resultados obtenidos, y sobre todo a aquellos que se avizoran en el futuro próximo. Los recursos destinados a las Nanociencias y la Nanotecnología (NyN) y el número de científicos y técnicos que laboran con nanoestructuras, nanomateriales, nanochips, etc., para obtener más conocimiento y satisfactores a partir del manejo atómico de la materia, dan prueba de la importancia que revisten para el futuro inmediato del hombre actual. Se dice que las NyN están generando una revolución tanto en la industria, como en la misma sociedad.

Sin embargo, dado lo limitado del actual conocimiento acerca de los efectos que tiene la manipulación de la materia a nanoescala, se ha abierto una línea de investigación para conocer dichos efectos y medir los posibles riesgos para establecer, con base en ellos, los mecanismos de control que sean necesarios; dicha investigación tiene vigencia prácticamente en todos los países. Este campo de estudio, aunque requiere de conocimientos precisos acerca de las características, ambientes, etc., de la manipulación de la materia en las NyN, se vincula necesariamente con la ética, disciplina filosófica dedicada al análisis integral de la acción humana. Los efectos de las NyN en el entorno natural y social en el que el hombre se desenvuelve son estudiados desde una rama de la ética aplicada: La 'nanoética', cuyo estudio, normatividad y aplicación, requieren de la participación de científicos y de filósofos, así como de sociólogos, antropólogos y políticos, entre otros.

El trabajo que presentamos ofrece un acercamiento a la práctica de la nanoética tomando como punto de encuentro el riesgo posible que genera primero la manipulación de la materia a nivel atómico, y luego la utilización entre la población de instrumentos, aparatos y maquinarias que incorporan nanomateriales o nanoestructuras.

Consta el trabajo de dos partes: Una teórica donde exponemos las características de la ética tomando como base la relación mutuamente constituyente entre la ciencia y la sociedad, específicamente en lo que se refiere a las NyN como una parte de la llamada ética aplicada, o nanoética. Una segunda parte ofrece una visión del terreno teórico y práctico donde se realizan actualmente la I&D de las NyN. La precisión de este campo incide directamente en la capacidad para ubicar el posible riesgo al que nos referimos; incluimos como caso práctico el trabajo de investigación actualmente en curso que versa sobre la administración de fármacos utilizando nanomateriales estructurados a esa escala. Consideramos que es necesario hacer un mapa de las actividades que se desarrollan en la I&D a escala nanométrica, porque esto permitirá avanzar de manera más precisa hacia el conocimiento de

sus características, que aunado a los principios de la nanoética, puedan definir claramente el riesgo y la responsabilidad moral tanto de los científicos como de la sociedad en general.

### P14 Nanotecnología, ética y cultura

Antonio Paoli *UAM-X*, Depto. de Educación y Comunicación

Estamos frente a un nuevo paradigma, la nanotecnología, cuyas teorías y prácticas podrían convertirse en el pensamiento más revolucionario que la ciencia haya conocido. Las prácticas sociales que se generarán al aplicar esta revolución del conocimiento, constituyen a la par una esperanza y una posible amenaza. La nanotecnología supone, por supuesto, el desarrollo de esta gran sociedad de la información en la que vivimos. Esta nueva ciencia sería imposible de imaginar sin los grandes avances científicos y tecnológicos, como son los microscopios de alta resolución; la cibernética, su enorme carrera digital y las gigantescas bases de datos disponibles fácilmente a través del internet, así como una inmenso basamdento institucional dada por gobiernos, empresas, universidades que estimulan la iniciativa de sus investigadores. Sin la nanotecnología al parecer sería imposible eliminar partículas contaminantes del aire y del agua, aumentar la velocidad de los microprocesadores, detectar el desarrollo de enfermedades antes de que los síntomas se manifiesten como molestias somáticas, sufridas por los pacientes. Severos problemas como se abordan con éxito desde esta nueva ciencia. los antes mencionados ya Señalaremos algunas transformaciones culturales que parecen perfilarse en el la humanidad, así como problemas éticos fundamentales que esta nueva horizonte perspectiva científica y tecnológica plantea a un nuevo paradigma

# P15 Anticipatory Governance of Nanotechnology

Matthew Harsh Center for Nanotechnology in Society Arizona State University

This paper argues that in order to guide the path of nanotechnology knowledge and innovation toward more socially desirable outcomes and away from undesirable ones, we must do more than conduct research on ethical, legal and social implications (ELSI) of nanotechnology. While ELSI research is necessary, ELSI work must be integrated into decision making about nanotechnology at many levels. This means not only decisions made by government policy makers and regulators, but by the public and by nanoscientists and engineers themselves. The paper introduces and discusses the concept of anticipatory governance as a means to build capacity for social learning in the nanoscience and engineering enterprise, and society more broadly, that expands and informs the available choices in decision making about nanotechnology. Anticipatory governance is thus a framework for society and institutions to seek and understand a variety of inputs to manage emerging technologies while such management is still possible. As a research field and means of technology assessment, anticipatory governance involves three activities: foresight, engagement and integration. Examples of these activities, and the utility of anticipatory governance in general, are discussed in reference to work of the Center for Nanotechnology in Society at Arizona State University.

# Nanoética: un nuevo campo para viejos problemas sobre el riesgo tecnológico

Jorge Enrique Linares Salgado
Facultad de Filosofía y Letras, Posgrado en Filosofía de la Ciencia, UNAM
lisjor@unam.mx

Palabras clave: nanoética, principios éticos, principio de precaución, riesgos tecnológicos

Desde una perspectiva de continuidad histórica, la nanotecnología representa una fase más en el desarrollo tecnológico-industrial moderno para buscar producir nuevos materiales y estructuras. En este sentido, los problemas éticos que suscita son los mismos que los de otras ramas convencionales de la tecnología: riesgos ambientales, sanitarios y sociales, así como el problema de la distribución y acceso equitativos a sus beneficios.

Sin embargo, algunos proyectos a mediano y largo plazo de la nanotecnología (principalmente en nanobiotecnología y producción de nanomáquinas) implicarían una verdadera revolución tecnológica que permitiría al ser humano no sólo transformar o utilizar la materia, sino fabricarla y (re)diseñarla, mezclando de un modo inédito la materia física y la materia biológica. Es estas posibilidades se abren problemas filosóficos muy profundos, fundamentalmente el de la índole de las producciones artificiales y el de la capacidad de controlar el diseño y operación de los artefactos producidos a nivel molecular o atómico. Así pues, las proyecciones revolucionarias de la nanotecnología parecen requerir desde ahora, en el debate social, una nueva ética aplicada: la *nanoética*. Pero ello implica un problema esencial: la nanoética tendría un carácter prospectivo, debe anticiparse a la realización de esos proyectos nanotecnológicos y no sólo enfrentar los problemas ya verificados.

Análogamente a la nanotecnología, la nanoética debe ser construida de un modo estructural distinto al de otras éticas aplicadas contemporáneas, justamente para responder a los nuevos problemas que están planteando las producciones nanotecnológicas. Desde este punto de vista, la nanoética tendría que ser un campo específico de la reflexión ética interdisciplinaria (nanociencias y filosofía) para prever, anticipar, establecer precauciones y orientar el desarrollo justo y sustentable de esa revolución tecnológica en marcha. La oportunidad histórica para la nanoética es única: por primera vez una revolución científica y tecnológica podría ser acompañada de una reflexión y debate público rigurosos, mediante procedimientos democráticos para encontrar el mejor modelo de desarrollo. De lo contrario, es decir, si la nanotecnología sólo será guiada por los factores de convencionales del mercado capitalista mundial, y por los sistemas de decisión tecnocráticos, a espaldas de los ciudadanos y sus necesidades reales, los riesgos y desigualdades sociales que puede provocar la nanotecnología serán inevitables.

En particular, el principio ético más controversial en el mundo tecnológico: el principio de precaución, es también aplicable a los desarrollos de la nanotecnología: para reducir los riesgos y evitar los daños en la salud humana, en otros seres vivos, en los ecosistemas, así como en la privacidad de las personas. Pero un enfoque ético-precautorio no sólo es aplicable a los riesgos, también a los beneficios factibles de la nanotecnología: se trata de lograr una equitativa y más justa distribución mundial y local de los beneficios de la

nanotecnología en áreas cruciales como energía, remediación ambiental, nuevos materiales sustentables, tecnologías médicas, tecnologías de la información y la comunicación, neurotecnologías.

En esta ponencia defenderemos la tesis de que la nanoética representa una modalidad distinta de ética aplicada (con respecto a las que ya se han consolidado como la bioética o la ética ambiental), necesariamente interdisciplinaria, y que tiene que ser construida a partir de principios éticos de alcance global: la responsabilidad, la precaución, la protección de la autonomía de las personas y la justicia social. Los objetivos principales de la nanoética tendrán que dar lugar a políticas para promover y resguardar la equidad y el acceso público a los beneficios, la seguridad ambiental, la seguridad de la salud humana y de otros seres vivos, la privacidad y la autonomía informacional, la interacción entre dispositivos artificiales y organismos vivos.

# MESA REDONDA 1: EDUCACIÓN EN NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

### **MR1-1**

# Las (escasas) iniciativas de educación y divulgación de la nanociencia y la nanotecnología en España

P.A. Serena<sup>1\*</sup>

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid Consejo Superior de Investigaciones Científicas c/ Sor Juana Inés de la Cruz 3 Campus de Cantoblanco 28049-Madrid, España \* Autor a contactar; e-mail: pedro.serena@icmm.csic.es

Palabras clave: Sociedad basada en el Conocimiento, Didáctica,

En un mundo de economía globalizada, el control de la nanotecnología permitirá a las economías que lideran el planeta mantener una ventaja competitiva sobre el resto de los países menos desarrollados. En estas economías avanzadas se están haciendo grandes esfuerzos por lograr que sus sociedades basen su competitividad en la generación de nuevos conocimientos. Por todo lo anterior, es clave que los países desarrollen estrategias para hacer llegar a la población, con diferentes grados de profundidad, conocimientos que les permitan participar en este cambio que se avecina. Países como EE.UU., Japón, Taiwán, Corea, Alemania, etc, han empezado a integrar la enseñanza de las nanotecnologías en los diversos niveles educativos, mediante la edición de materiales didácticos específicos, la implantación de contenidos de temática "nano" en las asignaturas de educación secundaria, el diseño de salas especializadas en museos de la ciencia, exposiciones itinerantes, etc. ¿Qué se está haciendo al respecto en Iberoamérica o en España, regiones de menor tradición científica? En la ponencia se describirán algunas de las escasas actividades puntuales que se han puesto en marcha en España, como la elaboración de una Unidad Didáctica [1], concursos o exposiciones [2]. Sin embargo, faltan iniciativas de mayor calado, con visión a largo plazo, que permitan a los ciudadanos tener una base sólida que mejore su capacidad de integración en la sociedad basada en el conocimiento, y les permita mantener una posición crítica ante los avances de la nanotecnología y las polémicas que estos avances suscitan.

**Agradecimientos.** El autor agradece a la Fundación de Ciencia y Tecnología y al Ministerio de Ciencia e Innovación, por el acceso a bases de datos, y al proyecto "NanoObjetos" de la Comunidad Autónoma de Madrid, por la financiación recibida.

#### Referencias

- [1] J.A. Martín-Gago, E. Casero, C. Briones y P. A. Serena, Unidad Didáctica de Nanociencia y Nanotecnología, Fundación Española de Ciencia y Tecnología (FECyT) (2008).
- [2] Concurso Internacional de imágenes SPMAGE (ediciones 2007 y 2009) y Exposición "UN vistazo al Nanomundo". Información en http://www.icmm.csic.es/spmage.

### **MR1-2**

# Aprendizaje. Adquisición por la práctica de una conducta duradera

#### Laura Viana Castrillón

Centro de Nanociencias y Nanotecnología-Universidad Nacional Autónoma de México C. P. 22860 Ensenada, B. C., México

En esta plática se discutirán las estrategias que se utilizarán en la carrera de Ingeniería en Nanotecnología, para lograr que los alumnos tengan un aprendizaje real de las asignaturas incluídas en el plan de estudios. Adicionalmente, se discute la importancia de que los alumnos satisfagan un perfil de ingreso que incluya un manejo adecuado de las matemáticas.

### **MR1-3**

# Programa integral de desarrollo regional de las nanociencias y nanotecnologia: Ensenada como coordinador

Fernando Rojas Iñiguez 1\*

<sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnologias, Universidad Nacional Autónoma de México Km 107 Carretera Ensenada-Tijuana

\*frojas@cnyn.unam.mx

Palabras clave: Nanociencia, Nanotecnologia, programa de desarrollo

En mundo actual, las sociedades basadas en conocimiento tienen una mayor potencial de apoyar un mejor desarrollo sustentable en áreas estratégicas de la regiones. El estudio y tecnologías a la escala nanométrica, donde la manipulación se realiza en la escala de átomos y moléculas para crear estructuras con propiedades novedosas proveen una gran oportunidad por su gran potencial en el desarrollo de productos nanotecnológicos con aplicaciones diversas. con aplicaciones diversas como medicina ( bio sensores) dispositivos nanolectronicos, nanocatálisis entre otras. La nanociencias y nano tecnologias (NN) son hoy en día grandes áreas de desarrollo estratégicas en muchas regiones del mundo donde las inversiones son considerables y de gran importanca. Asimismo, se observa la necesidad de crear un programa regional para NN, el cual nos daría la oportunidad de convertirnos, a mediano y largo plazo en un polo de desarrollo económico atractivo, con inversiones y programas para la creación y fortalecimiento en las capacidades en NN. El eje del trabajo es proponer a Ensenada como coordinador general de una propuesta regional en el ambiento de NN, donde estado, instituciones de educación superior privada o publicas, iniciativa privada participen en la estructuración de dicha propuesta de desarrollo regional donde se utilicen eficientemente las capacidades actuales de cada agente participante y se sienten la base para la creación donde se requieran. En este trabajo, presentamos los ejes o lineamientos generales de una propuesta integral para la planeación estratégica en el desarrollo de las área de NN en nuestro Baja California. Las líneas principales de las propuesta deben contemplar, entre otras cosas: I (a) diagnostico y evaluación de las capacidades de NN de nuestras instituciones educativas e industria regional que darian la base al y I (b) elaborar y operar programas regionales de difusión y comunicación de las NN tanto a niveles de educación básica como de sensibilización a la industria privada e inversionistas esto elementos darían la base de programa regional para continuar con II) la creación y consolidación, como primera etapa de redes de laboratorios estratégicos para la síntesis y caracterización de estructuras nanometricas, para continuar con la etapa III) la Transferencia de capacidades en dos vertientes; a) formación de recursos humanos de alto nivel en el áreas y b) manejo de infraestructura y finalmente poder llegar a la IV) vinculación directa para desarrollos e innovación de productos y/o servicios específicos en áreas estratégicas como medio ambiente, comunicaciones, medicina y materiales. Para detonador de la propuesta se proponen dos aspectos a trabajar en la primera etapa: I) la evaluación de capacidades en NN primero a nivel de ensenada y

después a otros municipios y II) programa de sensibilización a los inversionistas, Empresarios y gobierno de las bases conceptuales, virtudes, potenciales de la NN como detonador de innovación y desarrollo económico. En el trabajo se presentan propuestas de como realizar estas dos actividades En la propuesta en extenso se establece aspectos generales de las actividades de procesos de cada etapa, detallando requerimientos, productos esperados, servicios o resultados de salida de cada etapa así como propuestas o bases para las siguientes etapas, analizando las fortalezas, amenazas y retos.

# Nanostructural features as the basis for toughness in biological composites

Joanna McKittrick<sup>1,2</sup>, Po-Yu Chen<sup>2</sup>, Gustavo A. Hirata<sup>3</sup>, Ekaterina E. Novitskaya<sup>2</sup>, Steve Lee<sup>1</sup>, Irene Chen<sup>2</sup>, and M.A. Meyers<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Mechanical and Aerospace Engineering, UC San Diego, La Jolla, CA 92093

<sup>2</sup>Materials Science and Engineering Program, UC San Diego, La Jolla, CA 92093

<sup>3</sup>Center for Nanoscience and Nanotechnology, UNAM, Ensenada, MX

Biological composites, such as mollusk shells, bones, teeth, antlers and the armadillo shell are composed of an organic and inorganic phase. The organic phase consists of nanofibers of structural proteins such as collagen and keratin, and the inorganic phase consists of nanocrystalline platelets of calcium carbonate or hydroxyapatite. Biological composites are surprisingly tough, absorbing large amounts of energy before fracture. The toughness can be directly attributed to complex, hierarchical structure that causing crack deflection, twisting and bridging. The nanostructural features are the underpinnings of these macroscale observations. The organic/inorganic interfacial chemical and mechanical interaction provides the basis for the remarkable toughening ability. The biopolymer nanofibers arrangement provides mechanical interlocking for enhanced shear strength whereas the biomineral phase provides enhanced stiffness and tensile strength. This presentation will discuss in detail how the nanoscale features contribute to the outstanding toughness of biological composites.

# Materiales semiconductores nanoestructurados y su aplicación en dispositivos fotovoltaicos''\*

#### Gerardo Contreras Puente

Escuela Superior de Física y Matemáticas del IPN, Edificio 9, UPALM, 07730 México DF.

Las celdas solares para propósitos terrestres son principalmente fabricadas con materiales de silicio, de los compuestos semiconductores binarios, ternarios y cuaternarios de los grupos II-VI, III-V, y I-III-VI2. Muchas de estas celdas se procesan en la tecnología de película delgada y en multicapas, esto es son materiales amorfos, poli-, y microcristalinos. Las características de eficiencia fotovoltaica de los dispositivos se puede mejorar con la incorporación de material nanoestructurado en los procesos de fabricación. En esta plàtica presentamos algunos de los resultados obtenidos en estas capas y en los dispositivos solares fabricados en nuestros laboratorios del Instituto Politécnico Nacional y bajo la colaboración de otros organismos e instituciones.

\* Parte de esos proyectos son llevados a cabo bajo el patrocinio parcial del ICYTDF, CONACYT, SIP-IPN y la USAF.

### Nanotechnology opportunities in Flexible Electronics: Contacts, Dielectrics and Semiconductos

M.A. Quevedo-Lopez "

Department of Materials Science and Engineering, University of Texas at Dallas, Richardson, Texas, 75080: <a href="mayeredo@utdallas.edu">mquevedo@utdallas.edu</a>

The development of low temperature, thin film transistor processes that has enabled flexible displays also presents opportunities for flexible electronics and flexible integrated systems. Of particular interest are possible applications in flexible, low metal content, sensor systems for unattended ground sensors, smart medical bandages, electronic ID tags for geo-location, conformal antennas, neutron/gamma-ray/x-ray detectors, etc. In this talk, we review nanotechnology applied ton flexible electronics materials and devices and present recent results in our efforts to fully integrate complementary metal oxide semiconductors. We conclude with a discussion of the constraints of thin film transistors and remaining challenges.

### **P20**

### Nanostructured materials and devices for Information Storage and Micro-electronics

Ernesto Marinero Hitachi San José Research Lab., Estados Unidos

### **P21**

## Low temperature fabrication of Barium Titanate (BTO) films on carbon fiber employing Pulsed Laser Deposition (PLD)

G. Collins, D. Elam, R. Hackworth, R. Kotha, J. Pusateri, A. Ayon, A. Chabanov and C. Chen *University of Texas at San Antonio* 

In order to explore the functionalization of wearable fabrics for power generation, Barium titanate (BTO) was deposited employing Laser Pulsed Deposition (PLD) on carbon fiber fabric under conditions normally not considered ideal to produce optimum ferroelectric properties, namely, at temperatures as low as 100 °C and under various oxygen partial pressures. The remnant charge polarization and film resistance properties were evaluated to determine the effect of the aforementioned deposition conditions. The C-V characterization indicates that the BTO films still retained ferroelectric properties in films produced at temperature as low as 200 °C, below which, the behavior is only paraelectric. The effect of process gas pressure was pronounced and evident in all films down to this temperature, producing an enhancement of the polarizability inversely proportional to pressure. The orientation of the tetragonal state of these films was examined using XRD to find the effect of oxygen vacancies on the orientation of this perovskite as well as their insulating properties. The effect of temperature on orientation and composition was examined and some possible explanations for the observed effects are discussed.

### MESA REDONDA 2: REDES EN NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

### **MR2-1**

### Red de Nanociencias y Nanotecnología del Conacyt

Sergio Fuentes Moyado

Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Ensenada, Baja California

Se presentará la red temática de Nanociencias y Nanotecnología creada por el Conacyt con el objeto de promover la colaboración en la investigación en el campo.

### MR2-2 Red de Grupos de Investigación en Nanociencia (REGINA-UNAM)

Ignacio L. Garzón
Instituto de Física, UNAM

Se describirá el origen, objetivos, logros alcanzados, problemas detectados y perspectivas de REGINA-UNAM.

### **MR2-3**

## La implementación de la Nanotecnología en España: de la auto-organización a las Acciones Estratégicas.

P.A. Serena<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid Consejo Superior de Investigaciones Científicas c/Sor Juana Inés de la Cruz 3 Campus de Cantoblanco 28049-Madrid, España \*Autor a contactar; e-mail: pedro.serena@jcmm.csic.es

Palabras clave: Redes, Acciones Estratégicas, Política Científica

La reacción de la Administración Pública de España ante la llegada de la nanotecnología fue relativamente tardía en comparación con los impulsos gubernamentales de EE.UU., la Unión Europea, Japón, etc. Los grupos de investigación españoles se organizaron en redes como Nanociencia o NanoSpain [1] y lograron promover la Acción Estratégica de Nanociencia y Nanotecnología [2] que se mantiene vigente desde el año 2004. Esta actuación, junto con otras llevadas a cabo desde los gobiernos regionales, ha permitido consolidar, a través de proyectos de investigación y la financiación de infraestructuras [3], una estructura emergente que puede afrontar con éxito los futuros retos de formación de jóvenes investigadores, de generación de nuevos conocimientos multidisciplinares, y el fomento de su transferencia al sistema productivo. Sin embargo, el rápido deterioro de la situación económica, una estructura productiva basada excesivamente en el sector servicios, y la falta de coordinación de las iniciativas puestas en marcha en el ámbito de las nanotecnologías, pueden ralentizar el ritmo que España necesita para implantar de forma efectiva las nanotecnologías tanto en su sistema académico como en el entorno industrial.

**Agradecimientos.** El autor agradece a la Fundación de Ciencia y Tecnología y al Ministerio de Ciencia e Innovación, por el acceso a bases de datos.

#### **Referencias:**

- [1] La Red NanoSpain cuenta con más de 270 grupos de investigación adscritos. Más información en <a href="http://www.nanospain.org">http://www.nanospain.org</a>.
- [2] Información sobre la Acción Estratégica de Nanociencia y Nanotecnología en la web <a href="http://www.plannacionalidi.es/plan-idi-public/">http://www.plannacionalidi.es/plan-idi-public/</a>.
- [3] Información sobre la inversión pública realizada en España en nanotecnología durante el periodo 2004-2008 se puede encontrar en la Oficina Europea del Ministerio de Ciencia e Innovación (http://www.oemicinn.es/area5/area12).

### PARALELA ORAL 1

### **OP1-1**

### Estados de Floquet en Sistemas Nanoelectromecánicos

J. Villavicencio<sup>1\*</sup>, I. Maldonado<sup>2, 3</sup>, E. Cota<sup>3</sup> y G. Platero<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Ensenada, México. <sup>2</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, México.

<sup>4</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Madrid, España. \*e-mail: villavics@uabc.mx

Palabras clave: NEMS, Transbordador, Triple Punto Cuántico, Floquet, Cuasienergias.

El estudio de los sistemas nanoelectromecánicos (NEMS, por sus siglas en inglés) ha despertado gran interés debido a los nuevos regímenes de transporte que ocurren gracias a la interacción entre los grados de libertad mecánicos y electrónicos [1, 2], y a sus potenciales aplicaciones como detectores ultrasensibles de masa [3], fuerza [4] y desplazamiento [5], por mencionar algunas. En el contexto teórico, se destaca el estudio de las propiedades del transporte de un solo electrón asistido mecánicamente, conocido como régimen de transborde [6], en donde una nanopartícula oscilante actúa como un dispositivo móvil (transbordador), que opera en el régimen de bloqueo de Coulomb, y que transfiere un electrón de la fuente al sumidero en cada ciclo de oscilación mecánica. En el caso en el que el transbordador consista de un punto cuántico que oscila entre otros dos puntos cuánticos fijos, tendremos un modelo que se conoce como transbordador de triple punto cuántico (TDQS, por sus siglas en inglés) [7]. Recientemente hemos demostrado [8], mediante un enfoque puramente cuántico, que la corriente electrónica en un TDQS, en presencia de un campo eléctrico AC, exhibe resonancias que pueden ser descritas por relaciones de suma simples. Además, se encuentra que estas resonancias son producidas mediante combinaciones de bandas fonónicas y fotónicas. En el presente trabajo se estudian las características de la corriente electrónica en un triple punto cuántico estático, y en un TDOS, ambos en presencia de un campo AC, utilizando la teoría de Floquet. Específicamente, se explican las resonancias de la corriente como función del voltaje externo en términos de las propiedades de las eigenergías del hamiltoniano de Floquet. Encontramos que las reglas de suma pueden ser explicadas en términos del espectro de cuasienergías de Floquet asociadas a los puntos cuánticos individuales. En el caso estático, se presenta un enfoque perturbativo que permite encontrar expresiones analíticas de las cuasienergías como función del voltaje AC, en excelente acuerdo con los resultados numéricos obtenidos.

### Referencias

- 1. H. Park, et al., Nature (London) **407**, 57 (2000).
- 2. A. N. Cleland, Foundations of Nanomechanics (Berlin, Springer-Verlag, 2003).
- 3. K. L. Ekinci, Y. T. Yang, y M.L. Roukes, J. Appl. Phys. **95**, 2682 (2004); Y. T.Yang, C. Callegari, X. L. Feng, K. L. Ekinci, y M. L. Roukes, Nano Lett. **6**, 583 (2006).
- 4. D. Rugar, R. Budakian, H.J. Marmin, y B.W. Chui, Nature 430, 329 (2004).

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Ensenada, México.

- 5. R. G. Knobel y A. N. Cleland, Nature **424**, 291 (2003); M. Li, H. X. Tang, y M. L. Roukes, Nature Nanotech. **2**, 114 (2007).
- 6. L. Y. Gorelik, et al., Phys. Rev. Lett. 80, 4526 (1998).
- 7. A. D. Armour y A. MacKinnon, Phys. Rev. B 66, 035333 (2002).
- 8. I. Maldonado, J. Villavicencio, E. Cota y G. Platero. Physica E: Low-dimensiona Systems and Nanostructures **40**, 1105 (2008); J. Villavicencio, I. Maldonado, R Sánchez, E. Cota y G. Platero, Appl. Phys. Lett. **92**, 192102 (2008).

## Entrelazamiento térmico en un sistema de dos espines acoplados con intercambio en presencia de campo nuclear hiperfino

R. Guerrero<sup>1\*</sup>, F. Rojas<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Posgrado Fisica de Materiales, Centro de Investigación Científica y de Estudios Superiores de Ensenada y Universidad Autonoma de Baja Californian (UABC) Campus Valle de las Palmas

<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnologia, UNAM \* rjgm76@hotmail.com

Palabras clave: Entrelazamiento Cuántico, Espines, Computación Cuántica

La tecnología actual de computación en semiconductores no se encuentra diseñada para existir bajo un paradigma cuántico, y por lo tanto una nueva forma de computación debe ser diseñada y estudiada, la computación cuántica, basada en el equivalente al bit cuántico o qubit. Se ha propuesto el espín como el prototipo de qubit y en un trabajo importante Loss y Divincenzo[1] propusieron un par de espines acoplados con intercambio como base para las compuertas de dos qubit. Los cuales se han estudiado fuertemente tanto teórica y experimentalmente, con resultados prometedores. El entrelazamiento en sistemas compuestos es un recurso util en el procesamiento de información cuántica. En este trabajo estudiamos el entrelazamiento térmico de dos espines acoplados en el modelo de intercambio de Heisenberg en presencia de campo magnético efectivo estocástico producido por los núcleos en la aproximación cuasi estática y la interaccion espin-orbita tipo Dzyaloshinski-Moriya(DM). Nuestro resultados muestran dos regimenes como función de la temperatura, caracterizado con un valor critico del campo magnético externo, donde la concurrencia (medida del grado entrelazamiento) y polarización de un-espin muestran comportamientos complementarios. Para campos menores que el critico la concurrencia es cercana a uno para temperaturas bajas y para campos mas grandes del critico la concurrencia es muy pequeña. Relaciones entre el grado de entrelazamiento( medido con concurrencia) y una observable (polarización de espín) son determinadas numéricamente para el rango de temperaturas estudiados. Determinamos la temperatura critica, donde el entrelazamiento se anula, y demostramos que presenta un comportamiento cuadrado con la fluctuaciones del campo magnético nuclear y aumentando con el termino DM.

**Agradecimientos.** Se agradece apoyo del Proyecto PAPIT-UNAM IN110908

#### **Referencias:**

[1] Loss D. y D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A 57, 120-126 (1998)

### Structural properties of the adsorption of antimony and arsenic on the Si(110)-(2x3) surface.

Arely Huitzil-Tepanecatl<sup>a</sup>, Gregorio H. Cocoletzi<sup>b,c,d</sup> y Noboru Takeuchi<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Postgrado en Física Aplicada, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, BUAP, Apartado

Postal 52, Puebla 72000, México

<sup>b</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, Código Postal 22860, Apartado Postal 2732 Ensenada, Baja California, México,

<sup>c</sup>Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México, <sup>d</sup>Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla 72570, México

We have performed first principles total energy calculations to investigate the adsorption of Sb and As ad-atoms on the Si(110) surface using a (2x3) supercell. The energetics and atomic structures have been investigated in four atomic configurations. One structure is obtained by placing 1/3 of a monolayer (ML) of Sb (As) atoms on the Si(110) surface. The other three geometries are obtained by depositing 1 ML of Sb (As) atoms on the surface. In the first case the structure is formed by four trimers, in the second case the geometry is formed by zigzag atomic chains and in the third case the structure contains "microfacets". The energetics results of the Sb adsorption show that for low coverage the tetrahedrons formed by the adsorption of 1/3 ML is the most stable configuration, while in the monolayer region the zigzag atomic chain is the most stable structure. However, the total energies of the trimer and microfacets structures are slightly higher, indicating that under some conditions, they may be formed. In an experimental report it has been suggested that the adsorption of 1/3 and 1 ML of Sb corresponds to the low- and high-coverage in the experiments of Zotov et al. [A. V. Zotov, V. G. Lifshifts, and A. N. Demidchik, Surf. Sci. 274, L583 (1992)]. On the other hand, our results of the As adsorption show that for low coverage, the tetrahedrons in the adsorption of 1/3 ML also give the most stable configuration. However, at the 1 ML coverage, a structure formed by microfacets is the most stable structure, in agreement with previous results.

## Perspectiva empresarial de nanotecnología rubio pharma y asociados S.A. de C.V. Rd research & technology S.A. de C.V.

Oscar Rodrigo Dávila Rubio RD Research & Technology S.A. de C.V. Email: odavila@rdresearchtechnology.com

Palabras Clave: Nanotecnología, Investigación, Empresas, Sector Privado

El presente trabajo tiene como objetivo dar a conocer la perspectiva empresarial de RUBIO PHARMA Y ASOCIADOS S.A. DE C.V. y RD RESEARCH & TECHNOLOGY S.A. DE C.V., empresas que colaboran de manera conjunta y que comparten visión y estrategia tecnológicas para el desarrollo del sector de Nanotecnología en México.

Ambas empresas muestran una reseña de sus actividades, presentan su gestión de tecnología desde un contexto colaborativo con instituciones educativas, vinculando la academia con el sector productivo para potenciar el conocimiento generado aplicado a la mejora de productos y procesos que permitan contribuir al crecimiento económico del país y asimismo a la mejora de la competitividad.

Posteriormente presentan su participación en proyectos para el desarrollo de infraestructura y equipamiento para investigación y desarrollo de micro y nanotecnologías. Se señalan avances de proyectos y, específicamente se detalla la creación del Centro de Investigación y Desarrollo Ernesto Rubio Villa, el cual contempla infraestructura para Microtecnología, Nanotecnología y manejo de Células Madres con aplicaciones terapéuticas.

## Síntesis biológica de nanopartículas de plata y oro mediante el uso del hongo ascomiceto neurospora crassa.

Castro-Longoria E. <sup>1</sup>, Vilchis-Nestor A. <sup>2</sup>, Avalos-Borja M. <sup>3</sup>.

<sup>1</sup>Departamento de Microbiología, Centro de Investigación Científica y de Educación superior de Ensenada (CICESE), Ensenada, México. <sup>2</sup>Centro de Investigación en Química Sustentable, Universidad Autónoma del Estado de México (CIQS-UAEM), México. <sup>3</sup>Departmento de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), México. <u>ecastro@cicese.mx</u>

El desarrollo de métodos confiables y ecológicamente amigables para la síntesis de nanopartículas metálicas es un área de investigación muy importante en el campo de la nanotecnología. Sin duda, las nanopartículas metálicas serán una herramienta indispensable para el desarrollo de diversas tecnologías en el futuro. Actualmente su aplicación en el marcaje biológico, el desarrollo de agentes antimicrobianos, sensores y filtros ópticos entre otros es de especial importancia. Las nanopartículas de metales nobles como el oro y la plata tienen un uso potencial en varios campos, incluyendo el de la biomedicina, como el sistema de liberación de fármacos y tratamiento de algunos tipos de cáncer. En este trabajo se investigó la capacidad de biosíntesis de nanopartículas de oro y plata utilizando el hongo filamentoso Neurospora crassa. La formación de nanopartículas utilizando este hongo resultó exitosa y como indicador inicial se observó un cambio de coloración de la biomasa micelial al ser expuesta a las soluciones precursoras. A las 24h de incubación la biomasa cambió de amarillo pálido a café oscuro y a color púrpura durante la exposición a las soluciones de AgNO<sub>3</sub> y HAuCl<sub>4</sub> con una concentración de 10<sup>-3</sup>M, respectivamente. Se realizaron análisis mediante espectroscopía UV-Vis, microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopía de dispersión de energía (EDS) y microscopía electrónica de transmisión (TEM) para determinar y caracterizar la formación de nanopartículas metálicas. Se utilizaron imágenes de TEM para determinar la forma y tamaño promedio de las nanopartículas extraídas. Las nanopartículas obtenidas fueron principalmente de forma esférica con un tamaño promedio de 11.1±4.3 nm y 12.8±5.8 nm para plata y oro, respectivamente. Imágenes al TEM de secciones finas de células de Ag y Au nano-N. crassa confirmaron la formación intracelular de nanopartículas metálicas. Los resultados obtenidos indicaron que N. crassa puede ser una "nanofábrica" en potencia para la síntesis de nanopartículas metálicas. La utilización de este organismo ofrece grandes ventajas por ser no patógeno, además es fácil de cultivar y posee una alta tasa de crecimiento entre otros.

### Desarrollo de calzado innovador de modelo Nanoplata para pie diabético y personas de actividades forzadas y durante largo tiempo

N. Bogdanchikova<sup>1,\*</sup>, G. Amaya Corona<sup>2</sup>, E. Pineda Martínez<sup>3</sup>, J. Catalan<sup>2</sup>, A. Aruela <sup>2</sup>, R. Baptista<sup>2</sup>, A. Salinas Ramírez<sup>4</sup>, G. Hirata<sup>2</sup>, R. Estrada Rivera<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología UNAM Ensenada Baja California México 
<sup>2</sup>Universidad Autónoma de Baja California Ensenada, Baja California, México 
<sup>3</sup>Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo Morelia Michoacán, México 
<sup>4</sup>Manufacturera de Calzado San Rafael S.A. de C.V., León, Guanajuato, México 
<sup>5</sup>Forros Finos Zero S.A. de C.V, Guanajuato, Guanajuato, México 
\* Autor a contactar: bogdanchikova@gmail.com

Palabras clave: Nanociencia, desarrollo de calzado, nanopartículas de plata, pie diabético

Diabetes mellitus es una de las causas mas frecuentes de muerte en México [1]. Una cuarta parte de los pacientes presentaran complicaciones por pie diabético que llevaran a amputación de la extremidad afectada, y de estos 20% requerirá de una 2da amputación en 12 meses, 50% en menos de 5 años [2].

La manufacturera de Calzado San Rafael elabora zapatos especializados terapéuticos para diabéticos. En Nanomex08 dicha empresa expreso su interés en realizar una innovación a su producto. Para alcanzar dicho propósito se propuso agregar nanopartículas de Ag al cuero con el que se forra dicho zapato.

Al agregar las nanopartículas de plata se espera que estas actúen con el medio y eviten que dentro de los zapatos exista un ambiente propenso al desarrollo de bacterias y hongos. Esto evitará que alguna zona afectada del pie diabético sufra una infección estando dentro del zapato.

En el presente trabajo se ha desarrollado un método de impregnación de forro con nanopartículas de plata y se ha optimizado el estado de forro para impregnación. Se ha investigado la reproducibilidad del proceso. Estudio de la estabilidad de nanopartículas de plata en cuero se realizó por el modelación de la acción agresiva de un lavado con agua. Para el producto innovador de cuero con nanopartículas de plata, preparado en el proceso optimizado, se han investigados la actividad fungicida para *Cándida albicans* y la actividad bactericida hacia *Pseudomona aeruginosa*, patógenos frecuentemente asociados a casos de pie diabético complicado.

En base de los resultados del trabajo se ha desarrollado el primer modelo del calzado para pie diabético y para uso por personas de actividades forzadas y durante largo tiempo.

**Agradecimientos.** Autores agradezcan por apoyo financiero CONACYT y la UNAM por medio de los proyectos CONACYT 79062 y PAPIIT IN100908, respectivamente; Mayra

Ramírez Camacho, Eric Flores Aquino, Ing. Israel Gradilla Martínez y Mario Vega Aguilar por apoyo técnico.

### Referencias

- [1] G. Olaiz-Fernández, R. Rojas, C. A. Aguilar-Salinas, J. Rauda, S. Villalpando Salud Pública Méx. **49**, 331-337 (2007).
- [2] G. Rodríguez-Abrego, J. Escobedo de la Peña, B. Zurita, T. J.Ramírez Salud Pública Méx. **49**, 132 (2007)
- [3] M. A. Mendoza Romo, M. C. Ramírez Arriola, Revista de endocrinología y nutrición, 3, 165 (2005).

### Aplicación de nanopartículas de plata en ulceras de pie diabético

C. Almonaci<sup>1</sup>\*, N. Bogdanchikova<sup>2</sup>, M. Avalos B.<sup>2</sup>, V. Burmistrov<sup>3</sup>, G. Odegova<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Consultorio Medico 1094, Ensenada, México <sup>2</sup>CNyN-UNAM, 22800, Ensenada, México <sup>3</sup>Compania Vector Vita, Novosibirsk, Rusia \*Autor a contactar: almonaci2000@hotmail.com

Palabras clave: Nanopartículas, Plata, Ulceras, Pie Diabético

En el presente estudio presentamos los resultados que mostraron que nanoplata en forma de gel y crema (Argogel y Argocrema, Compañía Vector Vita, Novosibirsk, Rusia), es eficaz para tratamiento de pie diabético infectada Grado 1 (clasificación de Wagner), Grado I-B (clasificación de Texas), así como contra condiloma acuminado (Virus de papiloma humano) y fibroma digital adquirido (histiocitoma solitario).

Los tratamientos convencionales en estos casos son más largos, caros y tienen complicaciones. La gran ventaja de gel y crema de nanoplata es que las ulceras de pie de pacientes diabéticos con la aplicación diaria se mantienen limpias sin embargo retardan el proceso de epitalización. El beneficio de mantenimiento de la herida limpia es mayor en comparación con aplicación de plata coloidal liofilizada, y curación convencional con isodine. Cabe señalar que hubo una reducción del uso de medicamentos antimicrobianos conforme se aplicaba en cada sesión nanoplata.

En relación con condiloma acuminado y fibroqueratoma el resultado fue favorable con tendencia a la remisión.

**Agradecimientos.** Agradecemos el CONACYT por apoyo por medio del proyecto No 79062 y UNAM por proyecto PAPIIT IN100908.

## Characterization and in vivo evaluation of the antitumor activity of NPT-Cl@ nanoparticles in GBM animal model

T. López<sup>1,2,3\*</sup>, M. Alvarez<sup>2</sup>, E. Martínez<sup>1,2</sup>, J. Manjarrez<sup>2a</sup>, S. Arroyo<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Atención a la Salud, Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco, México

<sup>2</sup> Laboratorio de Nanotecnología, Laboratorio de Fisiología de la Formación Reticular, Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS", México

<sup>3</sup> Department of Chemical Engineering Tulane University, USA.

\* Contact autor: tessy3@prodigy.net.mx

**Keywords**: Catalytic Nanomedicine, Platinum nanoparticles, Glioblastoma multiforme, C6 cells

Treatment of GBM, a primary malignant tumor of the brain, is one of the most challenging problems. Surgery remains the basic treatment in which the bulk of the tumor is removed and the peripheral infiltrating part is the target of supplementary treatments. However, in most cases chemotherapy is ineffective and median survival of the patients is hardly increased. Since cisplatin demonstrated antitumor activity, numerous attempts to obtain new platinum complexes with better therapeutic performances than cisplatin have been made [1,2]. Novel nanoparticulated biocatalysts Pt have been developed. The solids were characterized using a wide variety of techniques: FTIR, N2 adsorption-desorption at 77K, SEM and TEM. The materials exhibit a high surface area as well as a broad pore size distribution. The method of synthesis has permitted to obtain a high dispersion of the platinum metal nanoparticles. Pyridine and acetonitrile adsorption experiments were carried out to evaluate surface acidity of the nanoparticles. The results showed the presence of Lewis acid sites. These biocatalysts were tested in an experimental model of C6 brain tumours in Wistar rats. Using stereotactic surgery C6 cells were inoculated into the motor cortex region. Once a tumor was developed, 10 mg NPT-Cl@ nanoparticles were placed at the same coordinates. After ten months, tumors were removed and processed sections were stained with Hematoxiline-Eosine (H-E) for microscopic analysis. Terminal Uridine Nucleotide End Labeling assay (TUNEL) was also performed to evaluate DNA damage. A significant decrease in tumour size and weight was observed in all cases.

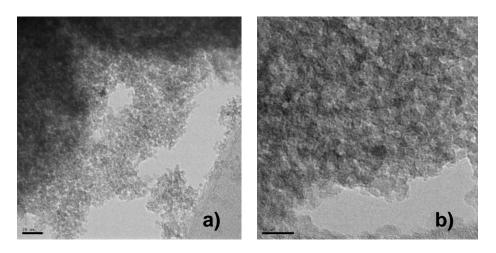


Figure 1. TEM micrographs of NPT-Cl@ nanoparticles.

**Acknowledgements.** Authors want to thank to CONACyT-FONCICYT project-96095, INNN and UAM-X.

### Referencias

- [1] Organization WWH, International Statistical Classification of Diseases and Related Health Problems, 10th revision. Geneva, 1992. Organization WWH, International Statistical Classification of Diseases and Related Health Problems, 10th revision. Geneva, 1992. [4] G.S. Nunes, P.B. Allen, and J.L. Martins, Phys. Rev. B **57**, 5098 (1998).
- [2] M. Markovic, N. Knezevic, M. Momcilovic, S. Grguric'-Sipkab, L. Harhajic, V. Trajkovic, M.M. Stojkovic, T. Sabo, D. Miljkovic, Eur.J.Pharm. **517**, 28 (2005).
- [3] D. Kovala-Demertzi, A. Galani, N. Kourkoumelis, J.R. Miller, M.A. Demertzis, Polyhedron, **26**, 2871 (2007).

### Design and characterization of novel biocatalysts for cancer treatment.

T. López<sup>1,2,3\*</sup>, M. Alvarez<sup>2</sup>

Keywords: Catalytic Nanomedicine, platinum biocatalyst, GBM

The adverse toxicological profile of cisplatin (cis-dichlorodiammineplatinum (II)), characterized by nephrotoxicity and neurotoxicity is the main factor that limit the clinical usefulness of this antineoplastic drug, specifically the possibility of applying it in effective high-dose regimens. In order to overcome these disadvantages, many efforts in the search for new drugs have been made. Due to this particularity, we designed platinum nanostructured materials (NPT- Ac@) with the purpose of obtaining novel materials with antitumoral activity to be used as an alternative in the treatment of certain type of tumors. The biocatalysts were prepared by the sol-gel route and synthesis parameters were controlled in order to obtain high surface area, high platinum dispersion and particles in the nano-size range. TEM, FTIR,  $N_2$  adsorption and XPS characterization studies of the samples were carried out. The method of synthesis enabled us to obtain a high dispersion of the metal. The biocatalysts were tested in C6 animal brain models, placing the biocatalyst directly in the tumor and a significant decrease in size was observed. These results demonstrate that using a minimum dose of platinum, dispersed on inorganic biocatalysts, can be effectively used in the treatment of localized tumors.

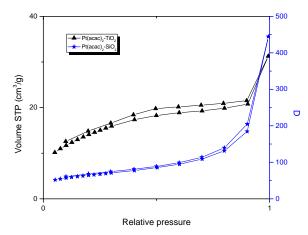


Figure 1. N<sub>2</sub> adsorption isotherm for NPT-Ac@ biocatalysts.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Departamento de Atención a la Salud, Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco, México

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Laboratorio de Nanotecnología, Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS", México

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Department of Chemical Engineering Tulane University, USA. \* Contact author: tessy3@prodigy.net.mx

**Acknowledgements.** Authors want to acknowledge to CONACyT-FONCICYT project 96095 for financial support.

### **References:**

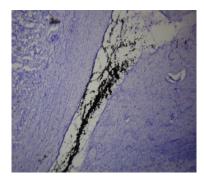
- [1] E.Reed , and K. W. Kohn, Platinum analogs. In: B. A. Chabner and J. Collins, (eds.). Cancer Chemotherapy: Principles and Practice, pp. 465-490. Philadelphia: J. B. Lippincott, 1990.
- [2] C.M. Giandomenico, M. J. Abrams, B.A. Murrer, J.F. Vollano, Harrap, K. R., Goddard, P. M., Kelland, L. R., and Morgan, S. E. Synthesis and reactions of a new class of orally active Pt(IV) antitumor complexes. In: S. B. Howell (ed.). Proceedings of the Sixth International Symposium on Platinum and Other Metal Coordination Compounds in Cancer Chemotherapy, pp. 93-100. New York: Plenum Press, 1991.

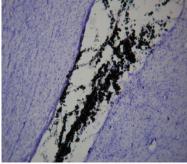
## Development of inorganic nanoparticles as novel carriers for chemotherapeutic agents: biocompatibility study in major species.

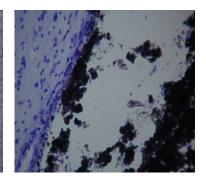
T. López $^{1,2,3*}$ , M. Alvarez $^2$ , A. Arellano $^2$ , E. Martínez $^{1,2}$ , D. Molina $^{1,2}$ , J. Avilés $^{1,2}$ .

Keywords: Catalytic Nanomedicine, platinum biocatalyst, GBM

Treatment of GBM, a primary malignant tumor of the brain, is one of the most challenging problems. Surgery remains the basic treatment in which the bulk of the tumor is removed and the peripheral infiltrating part is the target of supplementary treatments. However, the survival rate has increased only slightly over the past three decades. Nanotechnology emerges as a suitable tool in the search of new alternatives in the treatment of this type of diseases. In the present work we developed novel NT@ and NS@ nanoparticles and characterized the by FTIR, TEM and  $N_2$  adsorption in order to understand their activity. Biocompatibility test of the nanomaterials was carried out using 2 adult dogs (24- 36 kg). The animals were microinjected with a suspension of nanoparticles-water, using brain maps by means of stereotactic surgery. Hematoxiline-Eosine stain of the microinjection surrounded tissue showed that intact cells are intact in the treated area of the brain, with no evidence of inflammation in the injection area.







<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Departamento de Atención a la Salud, Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco, México

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Laboratorio de Nanotecnología, Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS", México

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Department of Chemical Engineering Tulane University, USA. \* Contact author: tessv3@prodigv.net.mx

Figure 1. Hematoxiline-eosine stain of brain region at 5x, 10x, and 40x magnification

**Acknowledgements.** To CONACyT-FONCICYT project 96095, and Dra. P. Arteaga for technical assistance.

## Estudio "in vitro" de la acción de NPt®-Ligando en líneas celulares de tumores de alto grado de malignidad

T. López<sup>1,2,3</sup>, M. Alvarez<sup>2</sup>, A. Rodríguez<sup>4</sup>, Miguel Galván<sup>4</sup>, M. E. Manjarrez<sup>4</sup>, J. Bustos<sup>1</sup>.

Universidad Autonoma Metropolitana-Xochimilco. Departamento de Microbiología. Calzada del Hueso 1100, Col. Villa Quietud, Coyoacán, C. P. 04960, México D.F,
 Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía "MVS". Laboratorio de Nanotecnología. Av. Insurgentes Sur3877, Col. La Fama, Tlalpan, 14269, México, D.F
 Universidad de Tulane, Depto. De Bioingeniería Molecular, Nueva Orleans USA
 Laboratorio de Virología, Instituto Nacional de Enfermedades Respiratorias, Tlalpan, México.

Se analizaron 10 compuestos nanoestructurados tipo **NPt**® en donde las partículas estaban soportadas en un material con diferente tamaño de partícula. Se experimentó con varios números de coordinación del metal central y diferentes grados de hidroxilación con la finalidad de optimizar los materiales nanoestructurados para que tuvieran un mayor efecto citotóxico.

Se probaron estos a diferentes diluciones sobre cultivos de una línea celular de Glioblastoma Multiforme (GBM), para analizar la citotoxicidad de estos compuestos sobre células cancerosas. Los resultados muestran que existe muerte celular vía apoptosis.

Se agregaron las mismas nanopartículas en las mismas condiciones a una línea celular de carcinoma de laringe (HEp-2), después de incubar por 12 horas, se purificó el DNA celular y se observó el grado de integridad de éste. Se encontró que existe una degradación mucho mayor del DNA con las partículas **NPt**®.

### PARALELA ORAL 2

### **OP2-1**

### Evolución del desarrollo de las nanociencias en México. Panorama constituido à partir de la comparación y cruce de métodos para el monitoreo de las nanociencias

E. Robles-Belmont<sup>1,\*</sup>, D. Vinck<sup>1</sup>

PACTE PO, University of Grenoble

\* Autor a contactar; e-mail: roblesbelmont@yahoo.fr

Palabras clave: Nanociencia, México, Panorama científico, monitoreo científico.

La emergencia de las nanociencias y nanotecnologías ha llamado la atención de diversos sectores institucionales a nivel mundial. Esto se refleja en los programas nacionales para el desarrollo de estas ciencias emergentes, tales como la Iniciativa Nacional para las Nanotecnologías en Estado Unidos y la creación de clusters y redes de excelencia en Europa [1]. Por otra parte, países en desarrollo, principalmente los llamados emergentes, también están orientando esfuerzos hacia el desarrollo de las nanociencias. Estos esfuerzos se reflejan en los resultados de la producción científica que se ha reportado en diversos trabajos académicos [2, 3, 4, 5 y 6], así como en la creación de programas nacionales, de instituciones de investigación [7, 8, 9] y de redes de colaboración científica [10, 11, 12].

Para estudiar las dinámicas de la producción dinámica en estas nuevas áreas, la literatura de la cienciometría se inclina sobre dos preocupaciones. La primera se refiere a la determinación de una estrategia metodológica que nos proporcione datos representativos sobre la evolución de las nanociencias. La segunda preocupación se centra simplemente en la caracterización de dicha evolución, dando así resultados útiles que pueden servir para el monitoreo de estas ciencias emergentes, entre otros estudios.

Sobre el caso particular de México, país en el que centramos nuestro estudio, ya se ha reportado su evolución en nanociencias utilizando diferentes métodos [5, 13, 14]. Pero para obtener un panorama representativo de la situación mexicana necesitamos obtener una descripción más detallada. Por esta razón, este estudio expone una comparación de cinco estrategias (nano\*, Noyons et al. [15], Glanzel et al. [16], Porter et al. [17] y Mogoutov y Kahane [18]) y un análisis de la fusión de los resultados de estas estrategias para construir una representación más relevante y confiable.

Este estudio muestra que en el comportamiento estadístico de los diferentes métodos utilizados es similar. Sin embargo, cuando analizamos los datos bibliográficos vemos diferencias en las disciplinas, las revistas científicas, las instituciones que publican y las colaboraciones con el extranjero. Finalmente, el panorama en nanociencias que presentamos se basa en los resultados obtenidos del cruce de las estrategias. Estos resultados nos muestran los principales actores institucionales involucrados en el desarrollo de las nanociencias, las disciplinas implicadas, las colaboraciones mantenidas tanto con la industria como con otros países. Por otra parte, hacemos también un análisis del lugar que ocupan las nanociencias en la producción en ciencias naturales en México y su posición frente a sus principales competidores económicos: los países emergentes.

### Referencias

- [1] Robinson, D.K.R. et al., Technological agglomeration and the emergence of clusters and networks in nanotechnology, Research Policy, Vol. 36, No. 6num, pp 871-879 (2007).
- [2] Kostoff, R. N., et al., Global nanotechnology research metrics, Scientometrics, Vol. 70, No. 3, pp 565-601, (2007).
- [3] Guan, J. y Ma, N., China's emerging presence in nanoscience and nanotechnology, Research Policy, Vol. 36, No. 6, pp 880-886, (2007).
- [4] Huang, C. et al., Nanotechnology Publications and Patents: A Review of Social Science Studies and Search Strategies, Working Paper Series #2008-058, UNU-MERIT, (2008).
- [5] Kay, L. y Shapira, P., Developing nanotechnology in Latin America, J Nanopart Res, Vol 11, No. 2, pp 259-278, (2008).
- [6] Pouris, A., Nanoscale research in South Africa: A mapping exercise based on scientometrics, Scientometrics, Vol. 70, No. 3, pp 541-553, (2007).
- [7] Foladori, G., Nanotechnology in Latin America at the Croassroads. Nanotechnology Law & Business, Vol. 3, No. 2, pp 205-216, (2006).
- [8] Foladori, G. y Zayago, E., Tracking Nanotechnology in Mexico. Nanotechnology Law & Business Journal, Vol. 4, No. 2, pp 211-222, (2007).
- [9] Martins, P. R., Domínguez-Dulley, R., Premebida, A. y Braga, R., Actividades relacionadas con la nanotecnología en Brasil, consultado el 20/08/09 en: <a href="http://www.estudiosdeldesarrollo.net/relans">http://www.estudiosdeldesarrollo.net/relans</a>, (2007).
- [10] Robles-Belmont, E., Las redes científicas como respuesta a la emergencia de las nanociencias y nanotecnologías, REDES, Vol. 29, No. 15, pp 93-111, (2009).
- [11] Hubert, M. y Spivak L'Hoste, A., Integrarse en las redes de cooperación en nanociencias y nanotecnologías. REDES, Vol. 15, No. 29, pp 69-91, (2009).
- [12] Pérez-Martelo, C.B., y Vinck, D., Redes sociotécnicas de co-gestión de conocimiento en nanotecnología en Colombia: ¿entre la visibilidad internacional y la apropiación local?, REDES, Vol. 29, No. 15, pp 113-137, (2009).
- [13] OICTI, La nanotecnología en Iberoamérica. Situación actual y tendencias, Informe del Observatorio Iberoamericano de Ciencia, Tecnología e Innovación del Centro de Altos Estudios Universitarios de la OEI, (2008).
- [14] Robles-Belmont, E., Vinck, D., y de Gortari-Rabiela, R., Desarrollo de las nanociencias en México: una visión a partir de las publicaciones científicas, Poster presentado en la Conferencia NanoMex08, Noviembre 2008, México, (2008).
- [15] Noyons, E.C.M. et al., Mapping Excellence in Science and Technology across Europe. Nanoscience and Nanotechnology, Report of project EC-PPN CT-2002-0001 to the European Commission, (2003).
- [16] Glänzel, W. et al., Nanotecnology: analysis of an Emerging of Scientific and Technological Endeavour, Report: Steunpunt O&O Statistieken, www.steunpuntoos.be, (2003).
- [17] Porter, A. L. et al., Refining search terms for nanotechnology, J Nanopart Res. Vol 10, No. 5 num,, pp 715-728, (2008).
- [18] Mogoutov, A. y Kahane, B., Data search strategy for science and technology emergence: A scalable and evolutionary query for nanotechnology tracking, Research Policy, Vol. 36, No. 6, pp 893-903, (2007).

### Deposition of nanostructured TiO<sub>2</sub> films by MOCVD: Effect of the experimental parameters on morphology and crystalline phase

J. A. Galaviz Pérez<sup>1</sup>, J. R. Vargas García<sup>2</sup>, J. A. Montes de Oca Valero<sup>3</sup>, Hector J. Dorantes Rosales<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Dept of Metallurgical Eng., ESIQIE-IPN, México 07300 D.F., MEXICO 
<sup>2</sup>Dept of Metallurgical Eng., ESIQIE-IPN, México 07300 D.F., MEXICO 
<sup>3</sup>CICATA-IPN Querétaro, Querétaro MEXICO 
<sup>4</sup>Dept of Metallurgical Eng., ESIQIE-IPN, México 07300 D.F., MEXICO

Corresponding author: e-mail: jgalaviz@ipn.mx

**Key words:** Nanostructured, Thin films, TiO<sub>2</sub>, Chemical vapor deposition, Morphology

We have investigated the development of morphology and crystalline phase of TiO<sub>2</sub> films prepared by MOCVD by using titanium tetraisopropoxide (TTIP) as precursor. The films were grown by a combination of homogeneous and heterogeneous nucleation processes that led nanostructured porous films and a compact nanoparticulated array respectively. The morphology of films was characterized by high-resolution scanning electron microscopy (HR-SEM) and atomic force microscopy (AFM). The microstructure was evaluated by Xray diffraction (XRD) and transmission electron microscopy (TEM). The deposition temperature kept constant at 500 °C. The evaporation temperature of TTIP, the Ar flow rate and the position of substrate was varied in order to change the progress in the formation of nanoparticles and its effect on morphology and microstructure. In the base case, at 45 cm from the inlet, when only evaporation temperature was increased from 60 to 90 °C, the film consisted meanly of anatase with the appearance of TiO phase and the morphology shifts from nanoparticulated granules to leaf-like agglomerates. The increasing of carrier gas flow from 30 to 90 sccm changed progressively the anatase polymorph film to oriented (200), (211) and to (200) microstructures; microstructure shifts from granular to dense. The simultaneous increase of TTIP temperature and Ar flow rate led to an oriented (301) rutile structure. Morphology shifted from granular to columnar and, above 80 °C, to fully dense of increasing roughness. When substrate distance was 15 cm, the microstructure was oriented (200) anatase reflection and a dense dentritic-like surface with cauliflower-like agglomerates. At 22 cm from the inlet the film was pure polymorph rutile and was formed by equiaxed granules with domes bigger than 10 µm.

### Obtaining of hydroxyapatite nanostructures using microwave heating

J. L. Cabrera<sup>1</sup>, R. Velázquez<sup>2\*</sup>, E. Rivera-Muñoz<sup>3</sup>

<sup>1</sup>CENAM- km 4.5 Carr. a los Cués, El Marqués, 76246 Querétaro.

<sup>2</sup> División de Investigación y Posgrado, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro. Cerro de las Campanas s/n, C.P. 76010 Querétaro, Qro., México.

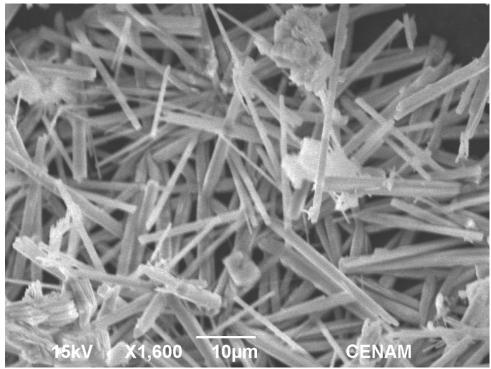
<sup>3</sup> Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 1-1010 Querétaro, Qro., Mexico, C.P. 76000

\* Autor a contactar; e-mail: rodrigo.velazquez@uaq.mx

**Key words**: Nanostructures, Hydroxyapatite, microwave heating.

Hydroxyapatite nanoplates and nanofibers have been synthesized using CaNO<sub>3</sub>, KOH and K<sub>2</sub>HPO4 as chemical precursors. Synthesis reactions were carried out inside of pressurized teflon vessels. Some reactions were performed in the presence of glutamic acid, and its effect on the morphology of nanostructures has been evaluated. The energy required for the synthesis was supplied by microwaves. Nanostructure size was controlled through the chemical composition of the reacting mixture, the variation of temperature and pressure within the teflon vessels, and the reaction time. The nanoplates and nanofibers obtained will be used to synthesize an organic-inorganic composite which has potential application on medicine and odontology.

X-ray diffraction was performed to verify the obtaining of a hydroxyapatite phase and to evaluate the reaction efficiency. High-resolution electron microscopy, selected area electron diffraction and atomic force microscopy were carried out for microstructure analyses. Energy-dispersive X-ray spectroscopy was used to evaluate the Ca/P ratio in all nanostructures



SEM image of ultra long nanofibers obtained. Morphology and dimension are noticeable. Acknowledgements. The authors want to knowledge the financial support of CONACyT 89516 grant, and to Jesus Arenas for the assistance on the HREM characterization.

### References.

- 1. Yunzhi Yang, Joo L. Ong, J. Mat. Sc. Let. 21, 2002, 67-69.
- 2. Hui Gang Zhang, Qingshan Zhu, Young Wang, Multiphase Reaction Laboratory, Institute of Process Eng., Chinese Academy of Sciences, 2005.

### Annealing effects on ZnO:B nanorods in Ar and O<sub>2</sub> atmospheres: a CL study

A. Susarrey-Arce<sup>1</sup>, M. Herrera-Zaldivar<sup>1,\*</sup> and J. Valenzuela-Benavides<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 356, Ensenada, B.C. 22800, México \*Corresponding author; e-mail: zaldivar@cnyn.unam.mx

**Keywords:** ZnO, nanorods, boron doping, cathodoluminescence.

We present results on the influence of boron doping and annealing treatments on the light emissions of ZnO and explained in terms of defects formation in the nanorods.

Boron doped ZnO nanorods were annealed in Ar and O<sub>2</sub> atmospheres in order to study their optical properties by cathodoluminescence (CL). ZnO:B samples with nominal 0.1, 0.2 and 0.3 mol % boron doping were grown by a low temperature hydrothermal method, producing nanorods with diameters between 50 - 500 nm and several microns of length with pyramidal shaped tips.

CL spectra of the as-grown samples revealed one emission band centered around 3.25 eV, related to free excitonic recombination, and another broad band at about 2.0 eV attributed to emissions caused by defects,

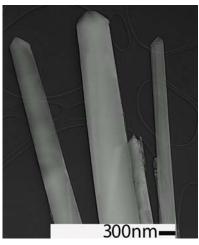


Fig. TEM image of ZnO nanorods doped with boron

generally assigned as yellow emission in ZnO. CL spectra from samples annealed at 600°C in Ar and O<sub>2</sub> atmospheres, revealed an increase in the band edge relative intensity, and the appearance of two defect-related emission bands centered at 2.5 eV and 1.8 eV. The effect of annealing on the formation of pits on the surface of the ZnO nanorods is also discussed.

**Acknowledgements.** This work was supported by PAPIIT-UNAM (Grant # IN107208). Technical help from E. Flores, E. Aparicio and F. Ruiz is also acknowledged.

### Synthesis of hydroxyapatite nanoparticles on silica gels

E. M. Rivera-Muñoz<sup>1\*</sup>, R. Huirache-Acuña<sup>1\*</sup>, R. Velázquez<sup>2\*</sup>, G. Alonso-Núñez<sup>3\*</sup>, S. Eguía-Eguía<sup>4,1\*</sup>

Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 1-1010 Querétaro, Qro., Mexico, C.P. 76000
 División de Investigación y Posgrado, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro. Cerro de las Campanas s/n, C.P. 76010 Querétaro, Qro., México.
 Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,

KM. 107, Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada, B. C. Mexico. <sup>4</sup> Facultad de Ciencias Fisico Matematicas, Centro, Universidad Autónoma de Nuevo León,

<sup>4</sup> Facultad de Ciencias Fisico Matematicas, Centro, Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey, 66450, Mexico.

\* Contact Author; e-mail: ... emrivera@fata.unam.mx

**Keywords**: Nanoparticles, Hydroxyapatite, Silica gel.

Synthetic, spherical shaped hydroxyapatite nanoparticles were grown on the surface of silica gels. The synthesis of those nanoparticles was obtained by immersing silica gels in a simulated body fluid (SBF) at 37°C. Silica gels were prepared by the standard sol-gel method using ethanol, tetraethyl orthosilicate (TEOS), water and fluorhidric acid (HF) as catalyst. In addition, different chemical additives (mono- and di-ethylene glycol and glycerin) were used to control the drying process on silica gels. The SBF was replaced every week to keep constant the Ca and P ion concentration.

After several weeks in the SBF, spherical shaped hydroxyapatite nanoparticles were observed by scanning electron microscopy (SEM) on the surface of silica-gel samples, and confirmed by energy dispersion spectroscopy (EDS), Fourier Transform Infra Red Spectroscopy (FTIR) and powder X-ray Diffractometry (XRD) analysis. Subsequent growth of hydroxyapatite was evaluated after 2-6 weeks of total soaking time in SBF. The additive type and soaking time in SBF does affect the nucleation and morphology of hydroxyapatite nanoparticles which competes with the formation of sodium chloride crystals.

As it can be observed in figure 1, hydroxyapatite nanoparticles show a highly regular shape with an average diameter of 300 nm, which grow in clusters over the surface of silica gels. Sodium chloride crystals are also present.

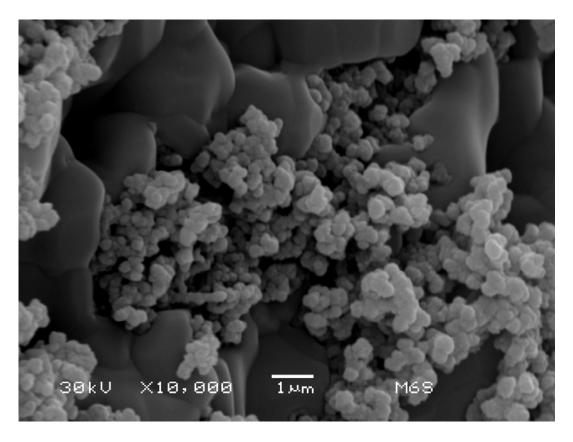


Figure 1.- Hydroxyapatite nanoparticles grown on the surface of silica gels.

### Acknowledgments.

The authors want to knowledge the financial support of PAPIIT IN108307 grant, UNAM. Also, authors want to thank M. S. Alicia del Real López and Mr. Antonio Loaeza for technical assistance in SEM analysis, Dr. Genoveva Hernández Padrón for technical assistance in FTIR spectrometry and Dr. Beatríz Millán Malo for technical assistance in XRD characterization.

## Nanopartículas de paladio en medio líquido iónico estabilizadas con ligantes tioéter-fosfina para su aplicación en reacciones catalíticas

López-Vinasco A.<sup>1\*</sup>, Martin E.<sup>1</sup>, Gómez M.<sup>2</sup>, Favier I<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química, UNAM, México

<sup>2</sup> Laboratoire Hétérochimie Fondamentale et Appliqueé, UMR CNRS 5069, Francia

\* E-mail Autor. angelamaria1016@gmail.com

**Palabras clave:** nanopartículas, líquido iónico, catálisis, hidrogenación, acoplamiento de Heck.

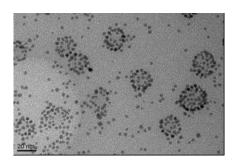
Debido al interés de llevar a cabo procesos catalíticos que tengan alta economía atómica, fácil separación de los productos, altas actividades y selectividades, y menor impacto ambiental, recientemente se han desarrollado sistemas catalíticos que combinan estas ventajas en nuevos medios de reacción, como son los líquidos iónicos (IL). Estos constituyen una alternativa en diferentes procesos catalíticos por la fácil separación de los productos orgánicos y la recuperación del catalizador<sup>1</sup>. En particular, las nanopartículas metálicas (NPs), por su pequeño tamaño y configuración electrónica tienen propiedades atractivas como catalizadores<sup>2</sup>, mostrando elevadas actividades y selectividades en reacciones de hidrogenación y de acoplamiento C-C<sup>3</sup>. Las NPs pueden ser preparadas en IL, el cual actúa como disolvente y estabilizante de ellas<sup>4</sup>, siendo una opción eficaz que tiene las ventajas de la catálisis homogénea y heterogénea.

En este trabajo se llevó a cabo la síntesis y caracterización de NPs de paladio estabilizadas por ligantes tioéter-fosfina, las cuales se evaluaron en reacciones de hidrogenación y acoplamiento de Heck.

Se sintetizaron 8 nuevas PdNPs por descomposición de  $[Pd_2(dba)_3]$  con hidrógeno, y en presencia de L (Fig. 1, relación Pd/L:1/0.2), en dos medios de reacción: a) THF (4 sistemas: Pd/L<sub>1</sub>, Pd/L<sub>2</sub>, Pd/L<sub>3</sub>, Pd/L<sub>4</sub>); b) IL (Fig. 2., 4 sistemas: Pd/L<sub>1</sub>/IL, Pd/L<sub>2</sub>/IL, Pd/L<sub>3</sub>/IL, Pd/L<sub>4</sub>/IL).

Figura 1. Ligantes tioéter-fosfinas Figura 2. IL: [EMI][MeO(H)PO<sub>2</sub>]

Por TEM se pudo observar: forma, tamaño y dispersión de las NPs. En THF éstas tienden a aglomerarse, a excepción de las NPs con  $L_1$  que no son regulares entre ellas, pero tienen forma esférica y están bien dispersas. Su  $d_m$  es de  $1.59 \pm 0.45$  nm. Cuando se usa el IL como disolvente, éste actúa también como estabilizante y las NPs preparadas en este medio, son regulares con forma esférica y están dispersas. El sistema con  $L_1$  presenta mejor dispersión, forma esférica y tamaño regular (Figura 3).



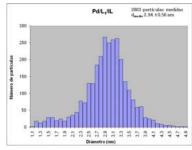


Figura 3. Micrografía de TEM de Pd/L $_1$ /IL y su distribución de tamaño 2.94  $\pm$  0.56 nm

Los sistemas  $Pd/L_1$ ,  $Pd/L_1/IL$ ,  $Pd/L_2/IL$ ,  $Pd/L_3/IL$  y  $Pd/L_4/IL$  se evaluaron como catalizadores en reacciones de Heck y de hidrogenación.

En Heck se obtuvo **I** (ca. 70%), y **II** (ca. 20%) figura 4 a). La hidrogenación del producto de Heck, puede explicarse mediante una reacción de transferencia de hidrógeno del IL, [EMI][MeO(H)PO<sub>2</sub>], al producto **I** dado al carácter ácido del imidazolonio del IL. También se evalúo el sistema Pd/IL sin ligante como catalizador, obteniéndose en Heck 92% de **I** y un 8 % de **II**. Significando que la presencia del ligante P,S en las NPs favorece la transferencia de hidrógeno en la reacción de Heck.

Figura 4. a) Reacción Heck, condiciones: 1 mmol (204 mg) de Iodobenceno, 1.2 mmol (0.1 mL) de metilvinilcetona, 1 mL (0.01 mmol de Pd) de PdNP. b) Reacción de hidrogenación, condiciones: 1 mmol (146 mg) de *trans*-4-fenil-3-buten-2-ona, 1 mL (0.01 mmol de Pd) de PdNP, T° 25-40 °C.

En las reacciones de hidrogenación, la conversión a **II** es c.a 30 % siendo muy similar a lo obtenido en Heck, lo que significa que la solubilidad del hidrógeno en las NPs/IL es muy baja, y el producto hidrogenadog es debido a la transferencia de hidrógeno más no por la adición de hidrógeno. Esto lo demuestra la reacción de **I** en presencia de Pd/L<sub>1</sub>/IL y en ausencia de hidrógeno, dando **II** c.a de un 30%. Para aumentar la solubilidad del hidrógeno, se añadió ciclohexano, obteniendo un 40% de producto hidrogenado. Comparando estos resultados con los obtenidos al usar Pd/IL sin ligante en la hidrogenación de **I**, la conversión hacia **II** es del 100%, lo que quiere decir que el ligante disminuye la reactividad de las NPs frente al hidrógeno presente en el medio de reacción.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen PAPIIT y a CONACyT por el apoyo económico otorgado.

### Referencias

- [1] P.J. Dyson et al., «Metal catalyzed Reactions in Ionic Liquids», Springer-Verlag, Berlin, (2005).
- [2] H. Bonnemann, R.M. Richards. Eur. J. Inorg. Chem. 2455, (2001) b) I. Favier, et al Chem. Commun. 3296, (2008)
- [3] a) A. Roucoux et al. Rev. 102, 3757, (2002), b) J.D. Aiken III, R.G. Finke. J. Mol. Catal A: Chem. 145, (1999). c) L. S. Ott, et al, Coord. Chem. Rev. 251, 1075, (2007)
- [4] S. Jansat, et al, ChemCatChem. DOI: 10.1002/cctc.200900127, (2009)

# Scanning tunneling microscopy of phthalocyanine molecules deposited on the iodine modified Au(111) surface: The first step towards room temperature molecular electronic devices development.

### Miguel Á. Venegas and Nikola Batina

Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Área de Electroquímica, Universidad Autónoma Metropolitana Izta1palapa (UAM-I), México D.F.

\*Autor a contactar, e-mail: mavdlc2003@yahoo.ca

**Keywords:** Molecular electronics, Ultra High Vacuum Scanning Tunneling Microscopy (UHV-STM), vertical nanointerconnects geometries and organic molecules.

Molecular electronics has established a well solid concept of using molecules as electronic components, with aims to build nanometer size functional devices. Many examples like memory elements, molecular rectifiers, molecular switches, and many others molecular devices have been proposed so far [1-3]. Thanks to the invention and improvement of Scanning Tunneling Microscopy (STM) techniques, nowadays, the molecular electronics research has aggressively been progressed. The possibilities to explore metal-vacuummolecule-metal junctions with Ultra High Vacuum (UHV) STM and Low Temperature (LT) UHV-STM facilities [8-10], have provided fundamental knowledge. This knowledge as regards to the physics and the electronics properties of single organic molecules deposited on certain substrate under the UHV environment. Still, more complex junctions are worthy to be studied, due to their possible technological impact, like the metal-vacuum-moleculeinsulator-metal junctions [5]. Where a solid support to understand the physics of vertical nano interconnects geometries, which is compatible with the STM geometry, is given. On the other hand, the Room Temperature (RT) STM studies are also of the special importance due to the needs of the exploration and operation at the atmospheric conditions of a previously prepared molecular device. It has been clearly shown that one Mono Layer (ML) of organic molecules can be deposited on the well defined substrate, I/Au(111) [6-7] and usefully characterized by RT-STM, in liquid [4] and at ambient conditions. Here, we are interested to present our preliminary results of the exploration at RT and ambient conditions of the Phthalocyanine (Pc) molecules on I/Au(111) sample previously prepared. A crucial step in this process is to understand the molecular layer structure and physical properties at the nanometer range (0.1 nm - 10 nm) of the Pc/I/Au(111) system. These preliminary experiments are followed by Scanning Tunneling Spectroscopy (STS) measurements and other UHV-STM studies.

**Acknowledgements:** to the UAM-I for the Post-doc studentship, to Sep-CONACYT project CB-2006-1-61242 and to the UAM multidisciplinary investigation project 13/2007.

#### **References:**

[1] A. Aviram and M. Ratner, Chemical physics letters, 29, 277 (1974).

- [2] C. Joachim, J. K. Gimzewski, A. Aviram, Nature, 408, 541 (2000).
- [3] D. M. Eigler, C. P. Lutz, W. E. Rudge, Nature, 352, 600 (1991).
- [4] A. Z. Stieg, H. I. Rasool, and J. K. Gimzewski, Review of scientific instruments 79, 103701 (2008).
- [5] P. Liljeroth, J. Repp, G. Meyer, Science, 317, 1203 (2007).
- [6] M. Kunitake, N. Batina and K. Itaya, Langmuir, 11, 2337 (1995).
- [7] N. Batina, M. Kunitake and K. Itaya, Journal of electroanalytical chemistry, 405, 245 (1996).
- [8] M. Alemani, S. Selvanathan, F. Ample, M. V. Peters, K. H. Rieder, F. Moresco, C. Joachim, S. Hecht and L. Grill, Journal of chemical physics, 112, 10509 (2008).
- [9] L. Lafferentz, F. Ample, H. Yu, S. Hecht, C. Joachim, L. Grill, Science, 27, 1193 (2009).
- [10] L. Grill and F. Moresco, Journal of physics: Condensed matter, 18, S1887 (2006)

## CL evaluation of defect structures in hydrothermally grown ZnO:Sb nanorods

A. González-Carrazco<sup>1,2</sup>, M. Herrera-Zaldivar<sup>2,\*</sup>,
J. Valenzuela-Benavides<sup>2</sup>, A. Escobedo-Morales<sup>3</sup> and U. Pal<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Posgrado en Física de Materiales, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada., Apartado Postal 2732, Ensenada, Baja California 22860, México.

<sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,
Apdo. Postal 356, Ensenada, B.C. 22800, México

<sup>3</sup> Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48,
Puebla, Pue. 72570, México

\* Corresponding author; e-mail: zaldivar@cnyn.unam.mx

**Keywords**: ZnO, nanorods, antimony doping, cathodoluminescence.

Cathodoluminescence emission of hydrothermally grown antimony doped ZnO nanostructures was studied in a scanning electron microscope (CL-SEM). Samples were prepared by varying antimony contents (2, 5 and 11 at%) during synthesis in order to study the effect of Sb doping concentration on the morphology and optical properties of such nanostructures. Incorporation of Sb during synthesis results in formation of nanorods with small aspect ratio, together with some Sb-rich nanoparticles [1]. TEM measurements of the 5 at% of Sb sample revealed exfoliation of {10-10} planes believed to be produced by antimony surface segregation.

CL spectra of the as-grown samples revealed several well defined emissions centered at 3.2, 2.74 and 2.0 eV, which can be attributed to excitonic recombination, and the so-called blue and yellow emissions, the latter related to intrinsic lattice defects. The intensity of the blue emission was found to be be strongly dependent on the content of Sb, indicating the formation of point defects upon Sb incorporation. After annealing the samples at 500 °C in Ar and  $O_2$  atmospheres, the blue emission intensity decreased considerably, while the yellow band red-shifted. Variations in the relative intensities of the yellow sub-bands might be responsible for the observed red shift of the yellow emission [2].

**Acknowledgements.** This work was supported by PAPIIT-UNAM (Grant # IN107208). Technical help from E. Flores, E. Aparicio and F. Ruiz are also acknowledged.

### References

- [1] A. Escobedo-Morales, U. Pal, M. Herrera-Zaldivar, Journal of Nanoscience and Nanotechnology **8**, 6551 (2008).
- [2] A. Gonzalez, M. Herrera-Zaldivar, J. Valenzuela, A. Escobedo-Morales, and U. Pal Superlattices Microstruct. **45**, 421 (2009).

## Highly active gold species supported on nanosized Ce-Al-O and Ce-Zr-Al-O mixed oxides for low temperature CO oxidation

A. Simakov<sup>1</sup>, E. Smolentseva<sup>1,\*</sup>, F. Castillon<sup>1</sup>, M. Estrada<sup>2</sup>, E. Vargas<sup>3</sup>, S. Fuentes<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CNyN-Universidad Nacional Autónoma de México, Ensenada, B.C., 22860 (México)

<sup>2</sup> Posgrado de Física de Materiales de CICESE, Ensenada, B.C., 22800 (México)

<sup>3</sup> Posgrado en Ciencias e Ingeniería, Área Nanotecnología, UABC, Ensenada, B.C., (México)

\* elena@cnyn.unam.mx

**Palabras claves**: Nanosized Ceria-Zirconia-Alumina Mixed Oxides, Sol-Gel, Gold Nanoparticles, CO Oxidation

Gold nanoparticles supported on various metal oxides have been shown to be active in several reactions: low-temperature CO oxidation [1,2] or water gas shift reaction (WGS) (CO+H<sub>2</sub>O) [3,4]. It has been demonstrated that catalytic activity of gold catalysts strongly depends on the gold particle size, method of gold deposition, pretreatment conditions and nature of the supports used [2]. Gold supported on nanocrystalline ceria was recently found to exhibit high activity in different reactions which was related with easiness of red-ox transformations of ceria. The ability of ceria to be reduced or oxidized depends on the presence of structural defects in ceria crystals. The number of structural defects could be increased by diminishing of ceria particle size or by partial replacement of Ce atoms with Zr atoms [5]. The present work was devoted to study the gold species supported on nanosized ceria and ceria-zirconia mixed oxides stabilized in alumina matrix.

The Ce-Al-O and Ce-Zr-Al-O supports with different content of  $CeO_2$  and  $CeZrO_2$  mixed oxides (10 and 30%) were prepared by sol-gel technique from organic precursors. Gold (~3 wt. %) was deposited on the supports by deposition-precipitation method using urea as precipitation agent. Gold catalysts have been characterized by temperature programmed reduction with  $H_2$  (TPR) or oxidation (TPO) and temperature programmed desorption in helium (TPD); XPS and UV-Visible spectroscopy; XRD and TEM and BET surface area. Catalytic activity test in CO oxidation and transient kinetic analysis were performed in a laboratory made flow micro reactor with in-line mass spectroscopic analysis. Residence time was about 10 ( $g_{CAT} \times h \times mol\ CO^{-1}$ ). Oxygen storage capacity (OSC) of supports was evaluated by CO pulses at 625°C.

Prepared supports are characterized with high surface area (about  $300 \text{ m}^2/\text{g}$ ) and nanosized ceria and alumina particles (1-6 nm). Partial replacement of cerium with zirconium leads to drastic decrease of ceria particles size and to improvement of OSC of supports.

The different gold species were found in the prepared catalysts: (i) gold cations (1+ and 3+); (ii) finely dispersed negatively charged gold species with diameter less than 1 nm; (iii) gold nanoparticles with diameter 2-5 nm. Relative content of gold species depends on the nature of support (alumina or alumina doped with ceria or

ceria-zirconia) and type of gas (hydrogen, oxygen or helium) used for catalysts treatments at 300°C. In contrary with alumina, ceria and ceria-zirconia based supports are quite effective in stabilization of gold cations as well as finely dispersed negatively charged gold species.

By means of transient analysis and FTIR of CO adsorbed it was revealed key role of mutual interaction between gold species and ceria vacancies in CO oxidation. Gold catalysts supported on nanostructured Ce-Al and Ce-Zr-Al mixed oxides prepared by sol-gel are characterized with superior catalytic activity in CO oxidation at room temperature in comparison with data presented in the literature.

**Agradecimientos.** The authors acknowledge E. Flores, A. Diaz, P. Casillas, M. Sainz, F. Ruiz, G. Vilchis Hurtado, E. Aparicio, J. Peralta for their technical support. This research project was supported by DGAPA–PAPIIT (UNAM, México) through Grants No. IN120706-3 and IN110208-3. Also, the authors acknowledge the Environmental Nanotechnology University Program (PUNTA-UNAM) and CONACyT grant 50547 for their support.

#### Referencias

- [1] M. Haruta, N. Yamada, T. Kobayashi, S. Iijima, J. Catal. **115**, 309 (1989).
- [2] G.C. Bond, D.T. Thompson, Catal. Rev. Sci. Eng. 41, 19 (1999).
- [3] D. Andreeva, V. Idakiev, T. Tabakova, A. Andreev, J. Catal. 158, 354 (1996).
- [4] F. Boccuzzi, A. Chiorino, M. Manzoli, D. Andreeva, T. Tabakova, J. Catal. 188, 176 (1999).
- [5] Trovarelli, A. "Catalysis by Ceria and related materials", Catalytic Science Series Ed. G.
- J. Hutchings, Imperial College Press, U.K., 2002.

#### **OP2-10**

### Effect of proton irradiation on graphene layers

D. H. Galvan<sup>1,4</sup>, A. Posada Amarillas<sup>2</sup>, S. Mejía<sup>3</sup>,, C. Wing<sup>5</sup>, and M. José-Yacamán<sup>4\*</sup>,

<sup>1</sup> On sabbatical from Centro de Nanociencias y Nanotecnología - Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, C. P. 22800, Ensenada, B. C., México.

<sup>2</sup> Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apartado Postal 5-088, C. P. 83190 Hermosillo, Sonora, México.

Palabras clave: Experimental-teórico

HRTEM analysis has been performed on proton irradiated graphene. The analysis indicates the existence of Moiré patterns produced by the rotations induced by the irradiation in between planes. The rotations measured fluctuate between 3 and 5 degrees respectively. These rotations may influence the electronic properties of the material under investigation. In order to explain the observed rotations in between planes, theoretical analysis were performed under the scheme of extended Hückel tight-binding method. Average total energy of the system was monitored through out the experiment composed of two graphene layers with two carbon vacancies and then intercalated in between the two layers. The results obtained indicate that the system remain semi metallic. Moreover, the theoretical results yielded that the 3 degree rotation is favored, although the 5 degree rotation is not discarded. Furthermore, energy bands as well as total and projected DOS were performed in order to provide more information about the electronic changes induced by the rotations applied to the system.

**Agradecimientos.** Authors would like to acknowledge Y. Flores and the people from Supercomputo-DGSCA UNAM for their technical support. This work was supported by grants NSF and the Welch foundation. The work is part of ICNAM Program at the University of Texas and CIMAV-CONACYT.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Nuevo León, San Nicolas de los Garza, Nuevo León, C. P. 66451, México.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Department of Chemical Engineering and International Center for Nanotechnology & Advanced Materials, University of Texas at Austin, Austin, TX, 78712, USA.

Donald@cmyn.unam.mx

#### **OP2-11**

# Singular grain boundaries around <0001> hexagonal semiconductor films: theoretical prediction and experimental validation

A. Ponce<sup>1,a</sup>, D. Romeu<sup>1</sup>, and P. Ruterana<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Laboratory for electron microscopy. Centro de Investigación en Química Avanzada. Blvd. Enrique Reyna Hermosillo, 140. Saltillo (Coahuila). 25253. Mexico

<sup>2</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México D.F., Mexico 01000.

<sup>3</sup>CIMPAP UMR 6252 CNRS-ENSCAEN-CEA-UCBN, 6, Boulevard du Maréchal Juin, 14050 Caen Cedex, France

<sup>a</sup> email: corresponding <u>aponce@ciqa.mx</u>

The present work shows the correlation between the higher-dimensional (HD) approach [1] for interfaces and the atomic distribution of the grain boundaries (GBs) around <0001> in GaN and ZnO epitaxial films [2-3]. The structure of all interfaces contained in a given equivalence class is isomorphic to the structure of the Translational States (TS) map of a singular interface. For every TS domain in the displacement space, there is an equivalent domain in real space of the same shape.

GaN/Sapphire and ZnO/Sapphire heteroepitaxial growths produce grain boundaries around <0001>. The GBs has been studied by high resolution transmission electron microscopy (HRTEM) in planar view projection. The atomic sequence in the GBs has been acquired by HRTEM and used to compare with the theoretical HD approach.

Physical parameters like a Burgers vectors and unit structure

The atomic structures for  $\Sigma 7$ ,  $\Sigma 19$  and  $\Sigma 13$  GBs have been calculated using the HD approach and compared with the shell-model [4] types with a good agreement. Moreover, the a good appropriate prediction between the boundary structures and the cores of the prism **a**-edge dislocation has been found.

#### **References:**

- [1] D. Romeu, *Phys. Rev.* B **67** (2003) 24202.
- [2] V. Potin, P. Ruterana, G. Nuet, R.C. Pond y H. Moroç, *Phys. Rev.*, B **61** (2000) 5587.
- [3] P. Ruterana, M. Abouzaid, A. Béré, and J. Chen. J. Appl. Phys. 103 (2008) 033501.
- [4] A. Béré and A. Serra. *Phys. Rev.*, B **66** (2002) 085330.

## SESIÓN DE CARTELES

## TÓPICO I. NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA EN BIOLOGÍA Y MEDICINA

#### CBM-1

## Epidemiologia Molecular del Virus de Inmunodeficiencia Humana: Explorando aplicaciones Nanobiotecnologicas con partículas de plata

J. Chavez<sup>1\*</sup>, R. C. Baptista Rosas<sup>2</sup>, N. Bogdanchikova<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Baja California. Facultad de Medicina, Tijuana, México

<sup>2</sup>Universidad Autónoma de Baja California. Escuela de Ciencias de la Salud, Ensenada, México

<sup>3</sup>Universidad Nacional Autónoma de México. Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Ensenada, México

\* Autor a contactar: rom11mex@yahoo.com.mx

Palabras clave: VIH, Epidemiologia Molecular, Drogo resistencia, Nanotecnología

Según la Organización Mundial de la Salud (OMS), la infección por Virus de inmunodeficiencia humana (VIH) es uno de los problemas más catastróficos en la Salud Publica Mundial. En el 2007, 40.3 millones de personas sufrían la infección y 3.1 millones murieron debido a esta [1]. En México, el pronóstico indica que el número asciende a los 120 mil con 5500 casos en Baja California Norte [2]. Otras fuentes indican que en Tijuana el numero podría encontrarse entre los 5 mil [3].

El desarrollo de drogo resistencia en el VIH es la causa inevitable de una inadecuada supresión del virus durante la terapia. El efecto es exacerbado por el alto indice de replicacion que tiene el virus *in vivo* [4] y la capacidad de transmicion de drogoresistencia que lo caracteriza. Tan solo en los EUA y Europa se calcula que el 20% de las nuevas infecciones son con un virus drogo-resistente [5-6].

Los estudios de epidemiología molecular en México muestran que las infecciones se deben al VIH-1 subtipo B, presente principalmente en EUA y Europa, y, que la resistencia a medicamentos se encuentra entre el 5-15% de los afectados [7-12].

La infeccion de celulas por el VIH es controlada por interacciones entre receptores celulares y virales. El receptor viral para la infección de la célula CD4+ son las glicoproteínas gp120 y gp41 localizadas en la superficie viral y se han descrito además correceptores denominados CXCR4 y CCR5 en linfocitos y macrófagos [13]. En el 2005 Elechegerra y cols. [14] describieron que nano-partículas de plata interactúan con la superficie viral, probablemente asociadas a estas glicoproteínas virales superficiales. Estudios posteriores han confirmado que la interacción de las nano-partículas de plata con los viriones de VIH en modelos *in vitro* desempeña una función cito-protectora inhibiendo

de alguna manera la replicación viral [15]. Sin embargo de estos hallazgos surgen algunas interrogantes importantes: ¿Se mantendrá la interacción entre nano-partículas y la superficie viral en las diferentes cepas virales descritas? ¿El efecto cito-protector es consecuencia de la interacción de nano-partículas con alguna o algunos de los receptores de membrana antes comentados? Las preguntas antes mencionadas no será posible contestarlas sin antes identificar las características genéticas de los VIH presentes en nuestra región. Por lo cual el estudio de la epidemiologia molecular y la drogoresistencia en VIH es escencial para investigar nuevos avances dentro del campo de la nanobiotecnologia.

Nuestros estudios piloto an mostrado que en el 2005 la falla virologica (personas en tratamiento con progrecion de la enfermedad) se encontraba entre el 50% de las personas bajo tratamiento. Mientras que en el 2008 se tomaron y congelaron muestras sanguineas de 54 pacientes VIH+ en Tijuana, 32 sin historial de tratamiento (17 mujeres hembarazadas) y 22 bajo tratamiento, con un porciento de falla virologica similar al determinado en 2005. Esto nos podria estar sugiriendo que la falla virologica se ha mantenido a traves del tiempo aun tras la introduccion de nuevos y mejores tratamientos. Efecto que pudiera estar relacionado con la generacion de virus resistentes a los tratamientos.

La importancia de la utilización de la nano-biotecnología en el desarrollo de este proyecto es el hecho que los agentes patógenos conocidos no desarrollan fácilmente resistencia a los efectos inhibitorios de las aplicaciones de nano-partículas de plata. Se propone realizar ensayos del efecto de nano-partículas de plata sobre un modelo experimental *in vitro* de linfocitos humanos infectados con diferentes cepas virales de VIH circulantes en Baja California.

#### Agradecimientos.

Agradecemos a CONACYT su apoyo por medio del proyecto No 79062 y PAPIIT-UNAM por medio del proyecto IN100908.

#### Referencias

- [1] Organización mundial de la Salud, (2008).
- [2] Centro Nacional para La Prevencion Del VIH SIDA, (2007).
- [3] S. Brouwer, et. al., Journal of Urban Health, (2006).
- [4] J. Coffin, Science, **267**, 483 (1995).
- [5] D. Richman, AIDS, 18, 1393 (2004).
- [6] D.Boden, JAMA. 282, 1135 (1999).
- [7] L.Eyzaguirre, AIDS Research and Human Retrovirus, 23, 331 (2007).
- [8] J. Gudino, International Conference of AIDS (1996).
- [9] L. Rivera, AIDS Research and Human Retrovirus, 1, 87 (2001).
- [10] V. Vazquez, HIV Medicine, **6**, 403 (2005).
- [11] O. Valle, Archives of Medical Research, 37, 1022 (2006).
- [12] R. Viani, International Journal of STD & AIDS, 18, 235 (2007).
- [13] B. Weiser, AIDS, 22, 469 (2008).
- [14] J. Elechigerra, Journal of Nanobiotechnology, 29, 3 (2005).
- [15] R. Sun, Chem. Commun, 28, 5059 (2005).

#### CBM-2

## Ecotoxicidad de CeO<sub>2</sub> nanoparticulado, en artemias salinas.

L. De la Cruz<sup>1, 2</sup>, E. Chavira<sup>1</sup>, A. Nieto<sup>3</sup>, C. Quintanar<sup>4</sup>, S. Torres<sup>5</sup>

e-mail: dualinlu@yahoo.com.mx

Palabras clave: toxicidad, nanopartículas, artemia salina, xerogel.

La elaboración de las nanopartículas se ha incrementado por sus múltiples aplicaciones (eléctricas, químicas, biológicas, etc.) Esto es debido a que el tamaño prevé propiedades como difusión rápida, áreas de superficie específicas altas, reactividad en la fase líquida y gaseosa y tamaños próximos a biomoléculas. Debido al desarrollo rápido en la síntesis de nuevos nanomateriales, crece la inquietud de preguntarnos acerca del impacto en el medio ambiente y la salud. Además de la relevancia de intervenir en la regulación sustentable de la producción y uso de materiales nanoestructurados [1].

El experimento se montó para trabajar con artemias salinas eclosionadas en el laboratorio. Con base en los resultados, las nanopartículas de CeO<sub>2</sub> que se emplearon, resultaron no tóxicas para estos crustáceos. De las diluciones de la suspensión xerogel-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH, se originaron más muertes que del CeO<sub>2</sub> mismo.

Las nanopartículas de CeO<sub>2</sub> se elaboraron por el método de sol-gel polimerizando con acrilamida. Para ello se partió de 1.9264 g de óxido de cerio (grado analítico) disueltos en 250 mL de agua caliente. Aproximadamente 25 mL de ácido nítrico para disolver el óxido. Después, aunque todavía sin disolver el CeO<sub>2</sub> se agregó 3.4040 g de ácido etilendiamintetraacético (EDTA) como agente quelante del catión Ce<sup>4+</sup>. Se adicionaron 91 mL de agua oxigenada para acelerar la solubilidad del óxido, quedando así y en agitación por 2.5 días en que se observó una solución sin precipitado. Después se midió el pH, que pasó de 1 a 6, agregando hidróxido de amonio al 30%. Manteniendo el sistema en agitación, se agregaron 25.6317 g de acrilamida, después 2.592 3 g de *N,N*-metilenbisacrilamida (agente entrecruzante); momento en el que la disolución tenía una temperatura de 80 °C. Agregado este último, se baja la temperatura para añadir α,α'-Azodiisobutyramidine dihydrochloride (AIBN), que fungió como catalizador de la polimerización (2.6098 g). El efecto de formación del gel fue inmediato después de añadir el AIBN. Después de 30 min, el recipiente se tapó para llevar a cabo una deshidratación a temperatura ambiente, durante un mes. Luego, se secó en un horno de microondas, adaptado con una atmósfera reductora de

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, A. P. 70-360, 04510 México, D. F., MÉXICO.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D. F., MÉXICO.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, A. P. 70-213, 04510 México, D. F., MÉXICO.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, 04510 México, D. F., MÉXICO.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Facultad de Ingeniería Química, Campus de Ingenierías y Ciencias Exactas, Universidad Autónoma de Yucatán, 97203 Mérida, Yucatán, MÉXICO.

gas argón, durante 40 min, empezando con una temperatura de 19 °C, regulándola cada 5 min (para evitar combustiones) hasta llegar a una T = 111 °C. Teniendo el xerogel, se molió en un mortero mecánico para obtener los nano polvos. Éstos se pasaron a crisoles de alúmina y se les dio un tratamiento térmico; partiendo desde 20 °C hasta 600 °C en rampas de 1 h subiendo de 10 en 10 grados centígrados la temperatura.

#### Ensayo con Artemia Salina

Para la preparación de la solución salina (SS) se pesaron 18.68 g de sal marina (Instant Ocean), disuelta en agua desionizada para tener un volumen de 0.5 L. Se agitó y filtró. En seguida se tomaron 50 mg aproximadamente, de quistes de Artemia y se depositaron en un recipiente de plástico con tapa. Después se agregó la solución salina al recipiente hasta casi cerca de la mitad de este para que las artemias eclosionaran en 48 h, dejándolo a temperatura ambiente. Al recipiente le fue agregada levadura de cerveza para alimentar a las artemias en el momento de la eclosión.

Por otro lado se tomaron 3 muestras pequeñas del xerogel de CeO<sub>2</sub> del tratamiento en el horno (no se pesaron debido a que éste es muy pegajoso y al manipularlo, quedaba casi por completo en la espátula o los guantes), estas muestras se disolvieron en 12 mL de SS y 5.9 mL de C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH (EtOH), teniendo finalmente una concentración de EtOH en la SS del 33 % v/v

Cumplidas las 48 h de eclosión, se lograron obtener artemias salinas. Éstas se sacaron del recipiente para después contar de 10 en 10, succionando con una micropipeta marcada con 100 μL. Cada uno de los 39 pozos contendría 10 artemias; en seguida y con la misma micopipeta, se completó el volumen de 100 μL con SS para cada pozo.

Aparte se hizo otra suspensión con nanopartículas de CeO<sub>2</sub> que ya se encontraban preparadas.

Así, en la microplaca se dividieron pozos para los blancos de SS, xerogel suspendido en agua y EtOH-xerogel, para tener, de los últimos tres, concentraciones finales de 1, 10, 100 y 1000 ppm, manteniendo dichas concentraciones por triplicado en los pozos. Pasadas 24 h, se hizo el conteo de las artemias muertas en cada pozo con ayuda de un microscopio óptico. Se consideró como muerta a aquella artemia que durante 10 s no presentara movimiento alguno de sus apéndices (antenas, anténulas y mandíbulas) ni del tubo digestivo. Para matar a las artemias y hacer el conteo final, a cada pozo se agregaron 100 µL de EtOH.

**Agradecimientos.** Se agradece la colaboración del Instituto de Química de la UNAM, por el apoyo proporcionado con sus instalaciones, equipo y material. Así mismo la colaboración del alumno Christian García, de la Facultad de Ciencias, UNAM. Financiamiento parcial de los proyectos: IMPULSA-Proyecto Universitario de Tecnología Ambiental PUNTA, UNAM, UNAM PAPIIT-IN109308, IN113509-3 y CONACyT 80380. *Referencia* 

[1] Oberdörster **et al. Particle and Fibre Toxicology** 2005 **2**:8 doi:10.1186/1743-8977-2-8; <a href="http://www.particleandfibretoxicology.com/content/2/1/8#refs">http://www.particleandfibretoxicology.com/content/2/1/8#refs</a>

#### CBM-3

## Obtención de polimerosomas de ciclofosfamida mediante la técnica de microfluídos

Quirino-Barreda<sup>1</sup> C T, Noguez-Méndez<sup>1</sup> N A, Cruz-Ruiz<sup>1</sup> G, Chávez-Castellanos<sup>2</sup> A E, Rojas-Oviedo<sup>1</sup> I.

<sup>1</sup> Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco. México, D.F. Departamento de Sistemas Biológicos. Calzada del Hueso 1100, Col. Villa Quietud. Delegación Coyoacán. C.P. 04960.

Autor a contactar. e-mail: <a href="mailto:cquirino@correo.xoc.uam.mx">cquirino@correo.xoc.uam.mx</a>. Dr. Carlos Tomás Quirino Barreda.

Palabras clave: nanopartículas, polimerosomas, ciclofosfamida.

La vectorización de fármacos es una de las alternativas terapéuticas de interés actual para el tratamiento de distintos padecimientos, entre ellos el cáncer, las enfermedades autoinmunes y el rechazo de tejidos y órganos trasplantados. La posibilidad de encapsulamiento de nano o picolitros de un fluído conteniendo compuestos de distinta naturaleza, la baja toxicidad de los copolímeros utilizados, así como su estabilidad *in vitro e in vivo*, hace de los polimerosomas una alternativa prometedora en aplicaciones como sistema de entrega de fármacos, la formación de células artificiales e inclusive la mimetización y funcionamiento como membranas celulares. <sup>1-4</sup> Con el propósito de encapsular el agente antitumoral e inmunosupresor ciclofosfamida<sup>5</sup>, mediante un sistema que por sus propiedades de tamaño de partícula y composición fuera estable y factible de conducir, liberar y entregar el fármaco en el sitio requerido, se propuso obtener vesículas poliméricas – polimerosomas – utilizando copolímeros de polibutil acrilato-ácido poliacrílico (PBA-PAA) y distintas técnicas para la formación del polimerosoma.

Materiales y métodos. Se estudió la formación de los polimerosomas utilizando dos copolímeros de PBA-PAA de diferente peso molecular promedio en peso (uno de 360 g/mol y otro de 7500 g/mol). Se probaron técnicas como el uso de codisolventes, la electroformación y los microfluídos. Con esta última, se buscó la formación de una doble emulsión mediante distintas condiciones de flujo de fase interna, media y externa, las cuales oscilaron en valores de 5000 – 200 μL/min, 1700 – 500 μL/min, y 7000 – 650 μL/min, respectivamente. La formación y estabilidad de las vesículas poliméricas se observó por microscopía óptica; resultando según las condiciones, la inexistencia de vesículas estables o la formación de polimerosomas (Fig. 1), con distintos tamaños de partícula. Una vez fijado el sistema óptimo, se encapsuló el fármaco y se observó el rompimiento de la membrana y liberación del principio activo, por exposición a un medio de HCl 1M (Fig. 2).

Conclusiones. La técnica de microfluídos permite obtener polimerosomas de PBA-PAA cargados con ciclofosfamida por doble emulsión, siendo clave en la formación de las vesículas, las propiedades del copolímero y las condiciones de flujo de fluídos en el sistema.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F. Facultad de Ingeniería, Circuito Exterior, Delegación Coyoacán.

**Agradecimientos.** Harvard University (School of Engineering & Applied Sciences / Department of Physics) en especial al Dr. David A. Weitz y Dr. Andrew S. Utada, por las facilidades brindadas para la realización de parte del trabajo experimental y a Rhodia (Center for Research and Technology- Bristol), por permitir el uso de algunas de sus materias primas.

#### Referencias.

- [1] Hamley, I.W., Nanotech 14, R39 (2003).
- [2] Discher, D. & Ahmed, F, Ann Rev Biomed Eng, 8, 323 (2006).
- [3] Lorenceau, E., et al., (2005).
- [4] Meng, F., et al. (2003).
- [5] Chabner, B. & Robert, T., Nature Rev Cancer, **5**, 65 (2005).

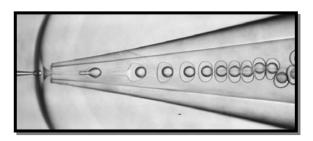


Fig. 1. Vista microscópica del polimerosoma degradación en el tubo capilar. Técnica microfluídos.

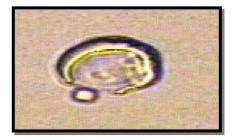


Fig. 2. Vista microscópica de la de la membrana del polimerosoma expuesto a solución 1 M de HCl.

#### CBM-4

### **Release Profiles of Aquasomes Loaded with Indomethacin**

Rojas-Oviedo<sup>1</sup> I, López-Torres<sup>1</sup> A, Reyes-Gasca<sup>2</sup> J, Quirino-Barreda<sup>1</sup> C T., García-García<sup>2</sup> R.

Contact Autor: e-mail: <u>irma19@correo.xoc.uam.mx</u>. Dra. Irma Rojas Oviedo.

**Key Words**; nanoparticles, aquasomes, release profiles, indomethacin.

Diverse technological strategies have been proposed in order to obtain nanoparticles, of a distinct nature<sup>1</sup>. Kossovsky<sup>2</sup> proposed a system to prepare nanoparticles transporting the so called aquasomes, whose particle size (around 100 nm) is appropriate to parenteral administration.

Aquasomes have a water absorbent nature which not only makes their aqueous transport permissible but also confers the possibility of establishing non-covalent links with distinct molecules and macromolecules like proteins promoting a mayor stability compared than liposomes<sup>3</sup>.

The aim of this study was to determined the release profile of Indomethacin loaded onto aquasomes. Intomethacin was our model drug used because of its low solubility.

#### Materials and Methods:

The inorganic cores obtained from calcium phosphate were coated with Lactose and then loaded with Indomethacin. After each step was carried out a filtration and a lyophilization. Structural analyses, particle size and morphology were evaluated and controlled by X-ray powder diffractometry, transmission electron microscopy (TEM), and scanning electron microscopy (SEM). Released profiles were determined by dialysis.

#### Conclusions:

The X-ray analysis of the samples and their observation through TEM and SEM allowed us to identify the nature of the nucleus, as well as the layers of Lactose and Indomethacin. The final particle size of the aquasomes was in the range of 60 to 120 nm, with a media of 90 nm. The method was reproducible under the used conditions. The dialysis was run and showed that 1.5 times more of Indomethacin was released from the aquasomes than from a physical mixture at the end of 24 hours. The aquasomes were able to release the drug better than the physical mixture.

- [1] Moein, S., Christy, A., Clifford, J. The FASEB Journal, 19 311 (2005).
- [2] N. Kosovsky et al. J Bmed. Mater. Res. **29** (5), 561 (1995).
- [3] Q.X. Yang et al, Biophys. J., 64, 1361 (1993)

112

 <sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Universidad Autónoma Metropolitana-Xochimilco. México D.F. Departamento de Sistemas Biológicos. Calzada del Hueso 1100 Col Villa Quietud CP. 04960 Delegación Coyoacán.
 <sup>2</sup> Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F. Instituto de Física, Circuito Exterior, Delegación Coyoacán.

## TÓPICO II. ENERGÍA Y MEDIO AMBIENTE

#### CEMA-5

# Estudio diagnóstico para la evaluación estacional de los niveles de material particulado fino y ultrafino en la cuenca atmosférica de Tijuana, B.C.

E. Castillo-Quiñones<sup>1,\*</sup>, G. Rodriguez-Ventura<sup>1</sup>, P. J. E. Quintana<sup>2</sup>, N. Bogdanchikova<sup>3</sup>

<sup>1</sup>UABC, Tijuana, México

<sup>2</sup>Universidad Estatal de San Diego, CA, EE. UU.

<sup>3</sup>CNyN-UNAM, 22800, Ensenada, México

\* Autor a contactar: castillo@uabc.mx; jaem78@hotmail.com

Palabras clave: Material Particulado Fino, Material Particulado Ultrafino

La ubicación de la región Tijuana-Rosarito-San Diego dentro de una misma cuenca atmosférica ha generado implicaciones en el deterioro de la calidad del aire, dando esto como resultado que algunos residentes fronterizos padezcan enfermedades respiratorias y cardiovasculares. Estudios epidemiológicos en donde se ha examinado la concentración de contaminantes en el aire en relación con estadísticas en materia de salud concluyen que elevadas concentraciones de material particulado (diámetro aerodinámico < 2.5 µm) esta asociado con incrementos de mortalidad y morbilidad [1, 2]. La concentración reportada de partículas que pueden ser asociadas con efectos adversos a la salud en estudios epidemiológicos es mucho mas baja que las que se observan en estudios toxicológicos de laboratorio e históricamente los toxicólogos no han sido capaces de demostrar el mecanismo por el cual bajas concentraciones de material fino pueden causar serios daños a la salud [3]. Se tomaron muestras de aire en el periodo comprendido de Octubre a Diciembre del 2008 durante el día, teniendo como punto de muestreo el techo del edificio de la Biblioteca Central de la Universidad autónoma de Baja California campus Tijuana (latitud 32° 31' 51" N, longitud 116° 57' 44" O, a 160 m sobre el nivel del mar) con un Aethalómetro portátil para medir carbono negro (Magee Scientific), un contador de partículas PM<sub>2.5</sub> (pDR-1200), un contador de partículas PM<sub>0.1</sub> (P-TRACK), monitores para medición de Temperatura, Humedad Relativa, Monóxido de Carbono (HOBO CO logger) y dirección y velocidad del viento con un anemómetro rotativo de cubeta con paleta de viento (Acurite). En las siguientes tablas se presentan los valores máximos y promedio por día de muestreo de cada uno de los parámetros medidos.

Como se observa en los resultados, los días 12, 13 y 14 de noviembre (30 % del total de las mediciones) sobrepasaron el limite máximo de exposición aguda en monóxido de carbono que marca la norma NOM-021-SSA1-1993 (11 ppm en un tiempo promedio de 8 horas con una frecuencia máxima de aceptable de una vez al año) y lo que estipula la oficina de Estándares Nacionales de Calidad de Aire Ambiental (NAAQS) de la Agencia de Protección Ambiental de E.U.A. (9 ppm en un tiempo promedio de 8 horas con una frecuencia máxima de aceptable de una vez al ano). Al comparar estos resultados con los obtenidos en las mismas fechas del año anterior, se observa una gran diferencia, lo cual indica un grave aumento en los niveles de este parámetro.

En cuanto a la concentración de  $PM_{2.5}$ , en ninguno de los días de muestreo sobrepaso el limite que indica la oficina de Estándares Nacionales de Calidad de Aire Ambiental (NAAQS) de la Agencia de Protección Ambiental de E.U.A. (35  $\mu$ g/m³ en un tiempo promedio de 24 horas), pero en todos hubo concentraciones máximas que si lo sobrepasan.

Al igual que lo observado en los niveles de CO, los días 12, 13 y 14 de noviembre fueron en los que se encontraron cantidades mayores de carbono negro (BC). Las cantidades más altas de  $PM_{0.1}$  se encontraron los días 6 y 13 de noviembre, y el día 3 de diciembre. Con excepción del día 6 de noviembre, en los días restantes se observo un porcentaje alto de humedad relativa, por lo cual esto nos indica que puede existir una relación entre ambos parámetros, lo cual a medida que avance este estudio se podrá comprobar esto.

Actualmente se están tomando muestras de aire con un impactor de cascada para material particulado ultrafino (PM  $\leq 0.1~\mu m$  de diámetro aerodinámico), y de esta manera conocer la distribución de estos materiales. Además se está realizando la medición de NO, NO<sub>2</sub> y NOx por difusión pasiva para complementar este estudio.

#### Referencias:

- [1] D. W. Dockery, C. A. Pope, X. Xu, J. D. Spengler, J. H. Ware, M. E. Fay, B. G.Ferris, F. E. Speizer, N. Engl. J. Med., **329**, 1753 (1993).
- [2] C. A. Pope, D. W. Dockery, J. Schwartz, Inhalation Toxicol., 7, 1 (1995).
- [3] R. B. Schlesinger, Inhalation Toxicol., 7, 99 (1995).

#### CEMA-6

# Fly ash effect on the fabrication of nano-SiC low thermal expansion materials

I. Juárez-Ramírez\*, A. A. Zaldívar-Cadena, A. Sánchez-Vázquez, S. I. Suárez-Vázquez.

Departamento de Ecomateriales y Energía, Instituto de Ingeniería Civil, Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Autónoma de Nuevo León.

Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, N. L. C. P. 66451

\*e-mail: isajua13@yahoo.com

**Keywords:** Fly Ash, SiC, Porous Materials, Low Thermal Expansion (LTE), Vitrified Bonding Material (VBM).

Porous materials having low thermal expansion have been fabricated using a mixture of SiC nanoparticles, fly ash, Vitrified Bonding Material (VBM) and LiAlSiO<sub>4</sub>. Powders were mixed in a planetary ball milling at 800 RPM during 1 hour and then uniaxiallly pressed and sintered at two different temperatures, 850 and 950°C. X-ray diffraction results showed that at 850 °C the LiAlSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> phase precipated as a consequence of the reaction between the VBM and the LiAlSiO4 phase. This result was confirmed by SEM analysis, where it was observed that the VBM phase is melted at 850°C. SiC and fly ash particles did not react at this temperature. Above 950°C fly ash particles started to melt, but SiC particles still remain without reacting. Porosity of the fabricated materials was around of 40% and Young's modulus was around of 10 GPa. Fly ash presence caused weakness on the porous material showing that there is not a favorable synergy between the fly ash and the VBM. Thermal expansion values of these materials were below 2x10<sup>-6</sup> K<sup>-1</sup>. Experimentation with the porous materials based in fly ash have shown to be a good option as filters for the removal of heavy metals as Lead in model concentrations similar to found in the waste waters of the industry.

#### CEMA-7

# Actividad catalítica de $CeO_2$ nanométrico en la oxidación de CO con $N_2O$

A. Gómez Cortés\*, F. González-Vigi, G. Díaz Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México \*e-mail: gomez@fisica.unam.mx

Palabras clave: CeO<sub>2</sub>, propiedades redox, CO, N<sub>2</sub>O.

Los materiales a base de cerio tienen aplicaciones importantes en varios campos tales como la catálisis, las cerámicas de alta temperatura, y las celdas de combustible, entre otros. La importancia tecnológica de la ceria está relacionada con el par redox Ce<sup>4+</sup>/Ce<sup>3+</sup> que le permite al material actuar como un reservorio de oxígeno [1]. Esta propiedad es particularmente útil en aplicaciones tales como los convertidores de tres vías donde el CeO<sub>2</sub> es un componente importante en la formulación. La eliminación de NOx y sus intermediarios de reacción como el N<sub>2</sub>O [2], así como, productos de combustión incompleta como el CO son algunas de las tareas del convertidor catalítico. En este trabajo se estudió la actividad intrínseca del CeO<sub>2</sub> nanométrico preparado por diferentes métodos como catalizador para la reacción de oxidación del CO con N<sub>2</sub>O. Se utilizaron tres métodos de preparación para el CeO<sub>2</sub>: precipitación homogénea con urea (PP), con plantilla de surfactante utilizando Brij 35 (B35) [3] y un método hidrotérmico (HT). Para este estudio las muestras se calcinaron a 500 °C. Los óxidos se caracterizaron mediante adsorción de N<sub>2</sub> (BET), TPR y XRD. Los resultados mostraron que los óxidos preparados con surfactante presentan mayor área BET. La evaluación de la actividad catalítica muestra que los tres grupos de nanocristales de CeO<sub>2</sub> son activos en el intervalo de 300 a 500 °C. Los productos de reacción fueron únicamente CO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>.

**Agradecimientos.** A los proyectos CONACYT 42666F y PAPIT IN-117706. Al LCMIF y al M. en C. Manuel Aguilar (Difracción de Rayos X).

#### Referencias.

- [1] J. C. Conesa, Catalysis Today, **143**, 315. (2009).
- [2] X. Cheng, A. Zhu, Y. Zhang, Y. Wanga, C.T. Au, C. Shi, Applied Catalysis B: Environmental **90**, 395 (2009).
- [3] D. Solís, A. Gómez-Cortés, G. Díaz, Studies in Surface Science and Catalysis, **162**, 363(2006).

#### CEMA-8

## Reactividad catalitica de Au-Ir/TiO<sub>2</sub> en la oxidación de CO

G. Díaz<sup>1</sup>\*, A. Gómez-Cortés<sup>1</sup>, R. Zanella<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México <sup>2</sup>Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México

\*Email: diaz@fisica.unam.mx

Palabras clave: Oro, Iridio, Oxidación CO, Catalizadores bimetálicos

En este trabajo se presenta un estudio sobre la reactividad catalítica del sistema Au-Ir/TiO<sub>2</sub> en la oxidación de CO. La preparación de nanopartículas de oro e iridio soportadas en TiO<sub>2</sub> (Degussa P25) fue realizada mediante depósito-precipitación con urea (DPU) utilizando el procedimiento reportado previamente [1]. El catalizador bimetálico fue preparado por depósito secuencial en dos etapas: en la primera se deposita Ir sobre el soporte mediante el método DPU, se calcina en flujo de aire a 400 °C y después se deposita el Au por DPU. La interacción de CO y CO+O<sub>2</sub> con la superficie de los materiales fue seguida por DRIFT. Adicionalmente se estudió la reacción de oxidación de CO en un reactor de flujo a presión atmosférica (RIG-100) en el intervalo de temperatura ambiente a 300 °C. Los tratamientos de activación así como el protocolo de preparación tuvieron un efecto importante en la estructura de las partículas de Ir y de Au-Ir, tal como lo muestran estudios por HRTEM [2]. El catalizador Ir/TiO<sub>2</sub> calcinado en aire o reducido en H<sub>2</sub> no presentó actividad a temperatura ambiente a diferencia del Au/TiO<sub>2</sub>. Este resultado se correlaciona con la observación por DRIFT que muestra una fuerte adsorción del CO sobre la superficie del iridio, inclusive a alta temperatura. En el catalizador bimetálico Au-Ir/TiO<sub>2</sub> activado en H<sub>2</sub> a 300 °C, se observó un efecto sinergético en la reactividad y una mayor estabilidad en función del tiempo de reacción comparado con el catalizador Au/TiO<sub>2</sub>. Los experimentos DRIFT mostraron que la interacción de Au e Ir podría modificar las propiedades de adsorción de CO presentadas por el iridio.

**Agradecimientos.** A Humberto Ramírez por la preparación de las muestras y al Proyecto PUNTA por su financiamiento.

#### Referencias

- [1] R. Zanella, S. Giorgio, C. R. Henry and C. Louis, J. Phys. Chem. B 106 (2002) 7634.
- [2] A. Gómez-Cortés, G. Díaz, R. Zanella, H. Ramírez, P. Santiago and J.M. Saniger, J. Phys. Chem. C, 113(2009)9710.

## TÓPICO III. NANOMATERIALES

## CNM-9 Adsorción de Sc sobre Si(001)c(2×4)

M. T. Romero<sup>1\*</sup>, Gregorio H. Cocoletzi<sup>2</sup>, N. Takeuchi<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad Autónoma de Coahuila.

<sup>2</sup> Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"-BUAP

<sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM

\* María Teresa Romero de la Cruz; e-mail: tromero@mate.uadec.mx

Palabras clave: Cálculos de Primeros Principios, escandio, silicio.

La adsorción de moléculas sobre superficies semiconductoras ha sido un tema importante de estudio, desde el punto de vista teórico y experimental, pues la presencia de las moléculas modifica los parámetros estructurales y las propiedades en las superficies. En este trabajo se realiza un estudio de la adsorción de Sc sobre la superficie semiconductora Si(001)c(2×4). El interés particular en este adsorbato se debe principalmente a que se pueden fabricar nanoalambres de disilisuro de escandio sobre la superficie de Si(001) [1]. Por otro lado, las propiedades químicas del Sc, un metal de transición 3d, tiene fuertes similitudes con metales del grupo 13 tales como el Al y Ga [2]. Particularmente, en este trabajo se realizan cálculos de energía total de la superficie Si(001)c(2×4) limpia y de la adsorción de diferentes cantidades de adsorbato sobre esa superficie. Los cálculos se realizan mediante métodos que se basan en la teoría del funcional de densidad (DFT, acrónimo de Density Functional Theory). Estos métodos son utilizados ampliamente en el estudio de propiedades del estado sólido y de superficies. El código que se utilizó en este estudio para calcular la energía total fue: PWscf (Plane Wave Self-Consisted Field). Se utilizó la aproximación de Gradiente Generalizado (GGA por sus siglas en inglés) con el funcional de Perdew, Burke y Enzerholf (PBE) [3] para calcular la energía de correlación e intercambio. Para realizar los cálculos se consideró una geometría de slab repetida, cada slab consiste en cinco capas con 16 átomos de silicio. Primero se realizaron cálculos de energía para la reconstrucción de superficie limpia de Si(001)c(2×4). Después se agregaron diferentes cantidades de adsorbato: 1 átomo de Sc sobre supercelda hasta 0.25 ML de Sc por supercelda. Se consideraron diferentes sitios de adsorción para cada una de las diferentes cantidades de adsorbato. Los cálculos indican que el sitio más favorable de adsorción, cuando un solo átomo de Sc es adsorbido en la supercelda, es en el centro entre cuatro dímeros de la superficie. Para la adsorción de dos a más átomos de Sc, los cálculos de energía indican que existe una dirección preferencial para la adsorción del escandio y es en la misma dirección que las cadenas de dímeros de la superficie.

**Agradecimientos.** Al programa de Mejoramiento del Profesorado (PROMEP) por el Apoyo a la Incorporación de Nuevos PTC 2008 PROMEP/103.5/08/3301. VIEP-BUAP por el apoyo 31/EXC/06-G.

#### Referencias

- [1] Y. Chen, D. A. A.Ohlberg and R. S.Williams, J. Appl. Phys. 91 3213 (2002).
- [2] C. Nörenberg, M.A. Moram, P.J. Dobson, *Surf. Sci.* **600**, 4126 (2006). [3] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865(1996).

## Studies of the adsorption of B and Ga on the GaN(0001) surface

- L. A. Palomino-Rojas<sup>1,\*</sup>, Gregorio H. Cocoletzi<sup>2,3,4</sup>, and Noboru Takeuchi<sup>3</sup>.
- 1. Física Aplicada, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Colonia San Manuel, Ciudad Universitaria, Puebla 72570, México.
  - 2. Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, Código Postal 22860, Apartado Postal 2732 Ensenada, Baja California, México.
- 3. Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México.
  - 4. Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla 72570, México.

#### \*plar88@yahoo.com.mx

Gallium nitride (GaN) has attracted the attention of many researchers as this material is being employed to manufacture light emitting diodes, which emit in the blue wavelength. The efficiency in the emission of light is directly related to the quality of the materials. Current growth techniques are not fully satisfactory. However, efforts have been made to improve the sample preparation [1]. In this work we perform first principles total energy calculations to study the adsorption of B and Ga on the GaN(0001) surface. Calculations are done within the density functional theory (DFT), using the generalized gradient approximation (GGA) [2], implemented in the QUANTUM-ESPRESSO code [3]. Our interest is to explore the formation of structures on the GaN(0001) surface and in the interstitial sites. For the studies we use a supercell with two types of periodicities, the wutzite structure and the structure of  $\sqrt{3}$ . For the first configuration we use an array of 2x2 with a total of 4 bilayers, while for the second we consider an array 1x1 with 5 bilayers, both in the (0001) direction. In the first step, we relax the supercells of GaN and then we deposit Ga on the surface of GaN on the high symmetry sites (T4, Top and H3) [4]. Similarly B is placed on the same sites of high symmetry. Additionally the atomic structure is investigated when B is placed between the two last bilayers, to investigate the adsorption in the interstitial site along the (000-1) direction. The high symmetry sites have the following positions; (0.16, 0.33, Z), (0.0, Z), (0.25, 0.25, Z) for T4, Top and H3 configurations, respectively. Our results show that the most stable structure in the adsorption of Ga corresponds to the T4-site, with similar results for B. When B is placed in an interstitial site the most stable structure is the Top-site.

#### References

- [1]. O. Ambacher, J. Phys. D 31, 2653, (1998).
- [2]. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
- [3]. S. Baroni, A. dalCorso, S. deGironcoli, P. Giannozzi, C. Cavazzoni,
- [4]. N. Takeuchi, A. Selloni, T. H. Myers, and A. Doolittle, PRB 72, 115307 (2005)

# CNM-11 AFM, STS and XPS study of PVD-grown $C_{60}$ fullerene films

O. Amelines-Sarria<sup>1,\*</sup>, P. C. dos Santos Claro<sup>2</sup>, A. A. Rubert<sup>2</sup>, G. A. Benitez<sup>2</sup>, P. L. Schilardi<sup>2</sup>, B. Blum<sup>2</sup>, V. A. Basiuk<sup>1</sup>, R. C. Salvarezza<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;

<sup>2</sup> Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, CCT La Plata - CONICET y Departamento de Química - UNLP, calle 64 y Dg-113, B1904DPI La Plata, Buenos Aires, Argentina

\* Author for correspondence; e-mail: oscar.amelines@nucleares.unam.mx

**Keywords:** AFM, STS, XPS, C<sub>60</sub> Fullerene, PVD films

Semiconducting fullerene C<sub>60</sub> films promise many applications as photovoltaic materials. We performed atomic force microscopy (AFM), scanning tunneling spectroscopy (STS) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) studies of flat and patterned C<sub>60</sub> fullerene films grown by physical vapor deposition (PVD) on metallic and semiconducting surfaces at room temperature. Three-dimensional patterns were obtained by evaporating the same films with a mask in front of the substrate (Stencil Lithography). C<sub>60</sub> evaporation from a W boat was performed at (2-4)×10<sup>-6</sup> Torr. Film thicknesses varying from 20 to 70 nm were measured by AFM, for films grown under different experimental conditions. Grain size and morphology are dependant on film thickness, with larger grains obtained for the thinner films. STS results for C<sub>60</sub>/Si(100) show band gaps in the 1.7 eV range, consistent with the C<sub>60</sub> band gap. Since, depending on experimental growth conditions, C<sub>60</sub> films with metallic, semiconducting, and insulating properties have been reported, C<sub>60</sub> films were also grown on Au and HOPG, under identical experimental conditions. STS band gaps of all C<sub>60</sub> films are in the 1.7 eV region. Additionally, XPS measurements for C<sub>60</sub>/Si show both the Si signal and the C<sub>60</sub> fingerprint. The above results taken together show that the C<sub>60</sub> films on different substrates are semiconducting, and can be useful for possible optoelectronic applications due to their homogeneity.

**Acknowledgements.** Financial support from ANPCyT (PICT 05-32906 and 06-621) and CONICET (PIP 08-362) of Argentina and CONACYT (grants U48863-R and 56420) of Mexico is greatly appreciated. O. A.-S. is also indebted to CONACYT for Ph. D. fellowship.

## Cálculos de primeros princípios de la estructura atómica de la adsorción de Al sobre GaN

R. García Díaz<sup>a</sup>, Gregorio H. Cocoletzi<sup>a,b,c</sup> y Noboru Takeuchi<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla
72570, México.

<sup>b</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, Código Postal 22860, Apartado Postal 2732 Ensenada, Baja California, México.

<sup>c</sup>Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México.

Realizamos cálculos de primeros principios para estudiar la estructura atómica de la adsorción de aluminio sobre las superficies (0001) y (000-1) del nitruro de galio con estructura wurtzita y periodicidad (2x2). Para los estudios empleamos la teoría del funcional de la densidad como está desarrollado en el paquete quantum ESPRESSO. La interacción electrón-ión se modela usando la teoría de pseudopotenciales ultrasuaves y la energía de correlación e intercambio mediante el método del gradiente generalizado. Para estudiar la superficie se usa la aproximación de la supercelda. La supercelda consta de cuatro bicapas con cuatro átomos de nitrógeno, cuatro de galio en cada una y terminación en galio para ambas superficies. Los enlaces sueltos de la parte inferior de la supercelda se saturan con átomos fraccionarios de hidrógeno. Las coordenadas de los átomos de hidrógeno y de las dos bicapas inferiores se fijaron para simular el ambiente de volumen. Los átomos restantes tienen movilidad total para que puedan encontrar sus posiciones de equilibrio. Se estudiaron varios sitios preferenciales en base a su simetría para ambas superficies: Top, H3, T4 y puente. En la configuración Top el átomo de aluminio se ubica sobre un átomo de Ga más externo, para H3 el átomo se encuentra en el sitio correspondiente a la secuencia de apilamiento de una fcc y en T4 ocupa el lugar de la secuencia de apilamiento hexagonal. Para estos tres sistemas, en ambas superficies, el aluminio tiene movilidad total. Para el caso de bridge se restringe su movilidad lateral, pudiendo solamente desplazarse en dirección perpendicular a la superficie. La posición T4 resulta ser la estructura atómica más estable. Resultados similares han sido reportados para la adsorción de galio.

## Nanostructured surface of Ni22%atSi alloy irradiated with nickel ions of 3.66 MeV at 650°C.

C. Camacho<sup>1, 2, \*</sup>, A. García Bórquez<sup>1</sup>, G. Rueda<sup>1</sup>, A. Ávila García<sup>3</sup>, A. Juanico<sup>2</sup>

Departamento de Ciencia de Materiales, IPN., ESFM, México, D.F., 07738
 División de Ingeniería Industrial y de Sistemas, UPVM, Estado de México, 54910
 Departamento de Ingeniería Eléctrica, CINVESTAV, México, D.F., 07340
 \*ccamacho@upvm.edu.mx

**Key Words**: Nanopeaks, Nanostructure, Surface, Irradiation, Nickel, Alloy.

The changes induced in the surface morphology and the possible mechanisms that promote them were studied for a Ni22%at.Si alloy after irradiation with nickel ions.

The samples were irradiated with 3.66 MeV nickel ions at doses of 77 dpa and 384 dpa and at 650°C of temperature. The samples were characterized by using atomic force microscopy (AFM). The rate of sputtering, ion range, ion trajectories and collision events were simulated by using the SRIM 2003 software.

There were founded nanopeaks, craters and a periodic structure of valleys on the surface, however, the principal change induced by irradiation was the formation of nanopeaks on the entire irradiated surface as shown in figures 1 to 3. The mechanism responsible of nanopeaks formation is the sputtering that depends of energy deposited on the surface, incident angle of ion beam and the initial surface microstructure [1-10].

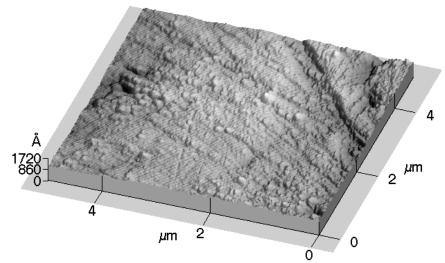


Figure 1. AFM Micrographie showing the microstructure of the Ni22%at.Si alloy before the irradiation with nickel ions.

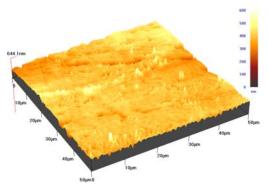
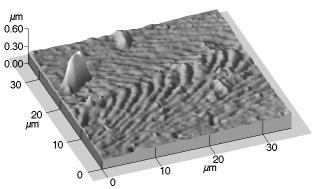


Figure 2. AFM Micrographie of the Figure Ni22%at.Si alloy showing the nanopeaks surface irradiated with nickel ions.



3. **AFM** Micrographie the alloy showing Ni22%at.Si distribution in a panoramic view of nanopeaks founded in the surface after the Irradiation with nickel ions.

#### **Acknowledgments**

We thank the financial support provided by CONACYT, CINVESTAV, IPN and Universidad Politécnica del Valle de Mexico, for this research.

#### References

- [1] O. Auciello and R. Kelly, Ion Bombardment Modification of Surfaces, Elsevier (1984).
- [2] S.G.B. Fishman, M. Ahmed and D.I. Potter, Materials Science and Engineering 90, 135-142 (1987).
- P.R. Okamoto and L.E. Rehn, J. Nucl. Mater. 83 (1979).
- [4] R.C. Piller and A.D. Marwick, *J. Nucl. Mater.* 71, 309 (1978).
- [5] A.D. Marrwick, R.C. Piller and P.M. Sivell, J. Nucl. Mater. 83, 35 (1979).
- D.I. Potter, P.R. Okamoto, H. Wiedersich, J.R. Wallace and A.W. McCormick, Acta [6] Metall. 27, 1175 (1979).
- [7] K.Y. Liou and P. Wilkes, *J. Nucl Mater.* 87, 317 (1979).
- [8] S.P. Lamond and D.I. Potter, J. Nucl Mater., 117, 64 (1983).
- P.C. Srivastava, V. Ganesan and O.P. Sinha, Radiation Measurement 36, 671 [9] (2003).
- [10] N.Q. Lam, T. Nguyen, G.K. Leaf and S. Yip, Nucl. Instruments and Methods in Physics Reserch Section B, 3 (1988).

# Caracterización de propiedades mecánicas de películas delgadas de nitruro de tántalo sintetizadas por ablación láser

Karla Paola Valdez Núñez<sup>1\*</sup>, W. De La Cruz<sup>2</sup>, J. Muñoz Saldaña<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada (CICESE).

<sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM.

<sup>3</sup>Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, campus Querétaro.

\*kvaldez@cnyn.unam.mx

Palabras clave: Ablación láser, nitruro de tántalo, nanoindentación.

El nitruro de tántalo es un material que presenta propiedades mecánicas y térmicas muy interesantes, lo cual lo hace muy atractivo para aplicaciones tecnológicas en la industria electrónica y de herramienta. En este trabajo se estudió la formación de nitruro de tántalo sintetizado por medio de la técnica de ablación de láser pulsado. El objetivo de este trabajo fue encontrar las condiciones experimentales que permitan depositar películas delgadas de nitruro de tántalo con altos valores de dureza y encontrar la relación de esta propiedad con la estequiometría de las películas, las propiedades morfológicas y estructurales. Durante el desarrollo de este trabajo, se estudió la composición química en función de parámetros de depósitos tales como: la fluencia del láser, la temperatura del sustrato, la presión de nitrógeno en el sistema de depósito, la orientación cristalográfica y el grosor de las películas, entre otros.

Las caracterizaciones que se realizaron son de cuatro tipos: fisicoquímica, morfológica, estructural y mecánica. El primer tipo de caracterización se realizó de manera *in situ* mediante espectroscopía de fotoelectones de rayos X y espectroscopía de electrones Auger con el objetivo de obtener información de la composición química. Se sintetizaron dos estequiometrias, la de TaN y la de Ta2N. El resto de las caracterizaciones se realizaron de manera *ex situ*, las cuales comprendieron principalmente: difracción de rayos X para obtener información de la estructura cristalina para TaN y Ta2N, ambas mostraron fase hexagonal; microscopia electrónica de barrido para estudiar su morfología, la cual fue relativamente uniforme y; nanoindentación, que reveló sus propiedades mecánicas, destacando durezas con intervalos de 22.3 a 33.9 GPa, y módulo de elasticidad de 285 a 379 GPa. Cabe resaltar que las películas con altos valores de dureza y módulo de Young se obtuvieron cuando los depósitos presentaban la estequiometría TaN y una estructura cristalina definida, para tal fin se tuvieron que realizar los depósitos a una presión de 40 mTorr de N2 durante el crecimiento y una temperatura de sustrato igual a 600 °C.

#### Agradecimientos.

A los proyectos CONACYT 50203 y DGAPA IN107508. Al Centro de Investigación Científica de Educación Superior de Ensenada (CICESE) y al Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM. También se agradece a Alex Tiznado, Eloisa Aparicio, Enrique

Sámano, Fabián Alonso, Guadalupe Moreno, Israel Gradilla, Javier Dávalos, Juan A. Díaz, Juan Peralta, Jorge Palomares, Margot Sainz, Mario Farías por su apoyo técnico y, a David Cervantes, Familia Valdez Núñez y González Avendaño, Fabio Chalé, Felipe Castillón, Gustavo Hirata, Isabel Ponce, Josefina Alvarado, Juan Manuel Alvarado, N. González, Philipe Robin por sus valiosos comentarios.

#### **Referencias:**

- [1] International Centre for Diffraction Data. JCPDS. 2003.
- [2] W. C. Oliver and G. M. Pharr. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indetation experiments. Materials Research Society. **7** (6). 1564. 1992.
- [3] Korsunsky, A. M., M. R. McGurk, S. J. Bull and T. F. Page. On the hardness of coated systems. Surface & Coatings Technology. **99**. 171. 1998.

### LDL/HDL on Au (111) substrate: AFM Visualization

## Aristeo Segura a,b and Nikola Batina b

a) Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma Benito Juárez de Oaxaca, Av. Univ. S/N, Col. 5 Señores. C.P. 68120. Oaxaca, México. ass@aristeosegura.com.mx b) Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Área de Electroquímica, Depto. de Química, CBI, UAM-Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Del. Iztapalapa, C.P. 09340. México, D.F., México. bani@xanum.uam.mx

#### **Keywords:**

LDL, HDL, Cholesterol, AFM

The low density lipoprotein (LDL) is known as the best vehicle for cholesterol transport inside the human body [1]. It is a positively charged spherical particle with 25 nm of diameter [2, 3]. Inside arteries, can deposit into solid plaque, causing a disease known as atherosclerosis. By general conditions it is characterized by thickening, hardening, and loss of elasticity of the walls of the blood arteries. The high density lipoprotein (HDL) is a negatively charged particle, with diameter of 12 nm. It participates in the lipid transport however not in the arterial plaguing [3].

The atomic force microscope (AFM) is an instrument of modern nanotechnology, molecular and surface science, capable to research molecular aggregates with low conductivity, revealing topography of surface at molecular scale. It can operate in variety of media, including aqueous, which is of a special importance for visualization of the biological surfaces [4]. As majority of the samples for the AFM analysis, LDL and HDL were fixed at the atomically flat Au (111) substrate. Samples were prepared from very diluted physiological solutions:  $8x10^{-14}$  M LDL and  $8x10^{-13}$  M HDL at 37 °C and visualized by AFM, in air.

Beside observation of the individual molecules, very interesting aggregates of LDL and HDL were seen, too. LDL aggregates form some kind butterfly like features, which show great affinity towards the gold substrate (especially terraces) because of there's hydrophilic character. Some of lipoproteins were found to be aggregated in form of tetrameters with size of 130 nm in diameter (Fig. 1).

HDL molecules mainly were found to be adsorbed at borders of the gold sample, preferring rather substrate steps than flat terraces. The adsorbed adlayers of HDL were found to be 32.7 nm high.

The observed differences in the adsorbed layer structure and preferential adsorption sites, were discussed from point of the different type of interactions of LDL and HDL with the gold substrate.

#### Acknowledgments

This research work was realized with the support of Instituto Mexicano del Petróleo (IMP), Proyect FIES-98-100-I and Professors Improvement Program (PROMEP-SEP).

#### References

- [1] Brown M. S., Goldstein J. L., Investigación y Ciencia **100**,30 (1985).
- [2] Chapman M.J., Laplaud P. M., Journal of lipid research, 29,442 (1988).
- [3] Chouinard Julie A., Khalil Abdelouahed, Vermette Patrick, Microscopy Research and Technique, **70**,904 (2007).
- [4] Cheung M. C., Albera J. J., Journal of lipid research, **20**,200 (1979).
- [5] G. Binnig, C.F. Quate, Ch. Gerber. Physical Review Letters, 56,930 (1986).

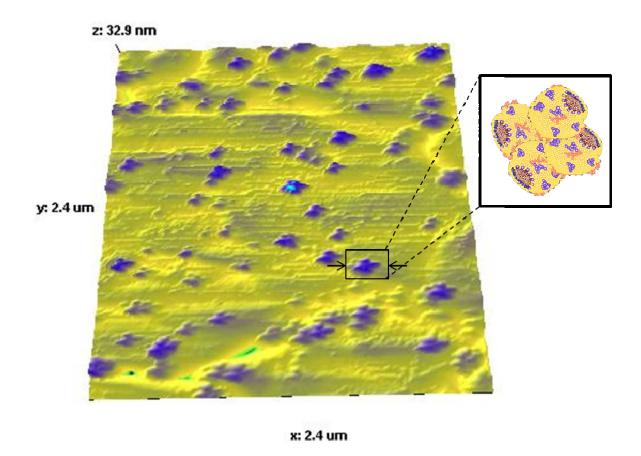


Fig. 1. AFM image of the LDL molecules on the Au (111) substrate, prepared from  $8x10^{-14}$  M in water dilutions

# Estudio de la estructura atómica de la absorción de aluminio sobre Si(111)

Adrian N. Badillo García<sup>1</sup>, Gregorio H. Cocoletzi<sup>1,2,3</sup> y Noboru Takeuchi<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla 72570, México.

<sup>2</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, Código Postal 22860, Apartado Postal 2732 Ensenada, Baja California, México.

<sup>3</sup>Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México. \*Autor a contactar: adrianbg@sirio.ifuap.buap.mx

Palabras clave: Nanociencia, Cálculos de Primeros Principios

Realizamos cálculos de primeros principios para la energía total con el fin de estudiar la estructura atómica de la adsorción de aluminio (Al) sobre silicio (Si) (111) en diferentes configuraciones. Los cálculos los realizamos dentro de la teoría del funcional de la densidad usando el código PWscf que viene en el paquete de Quantum ESPRESSO. La energía de correlación - intercambio se ha tratado con la aproximación de gradiente generalizado mediante la parametrización de *Perdew-Burke-Ernzerhof* y para la energía de interacción electrón - ion se han considerado los pseudopotenciales ultrasuaves de Vanderbilt. Hemos estudiado la adsorción de Al sobre Si(111) en las siguientes periodicidades: 4x1 y  $\sqrt{3}$  x  $\sqrt{3}$ . En la periodicidad 4x1 la geometría que se observa es la formación de alambres atómicos en forma de zigzag, estructura similar a la que se obtiene en la adsorción de In sobre Si(111)-(4x1). En el caso de la periodicidad  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  hemos considerado varias geometrías: top, bridge, H3 y T4. En la configuración top el átomo de aluminio se ubica sobre un átomo de Si externo, para H3 el átomo se encuentra en el sitio correspondiente a la secuencia de apilamiento de una fcc y en T4 ocupa el lugar de la secuencia de apilamiento hexagonal. La estructura más estable en la periodicidad  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  es la configuración T4. Hemos investigado también la posible difusión de Al en la superficie.

# In situ XPS study of TiO<sub>x</sub> deposited by magnetron sputter deposition H. Tiznado<sup>1,\*</sup>, J. Olazaba<sup>2,\*</sup>, O. Martín<sup>2</sup> and W. De La Cruz<sup>1,\*</sup>

H. Tiznado<sup>1,\*</sup>, J. Olazaba<sup>2,\*</sup>, O. Martín<sup>2</sup> and W. De La Cruz<sup>1,\*</sup>

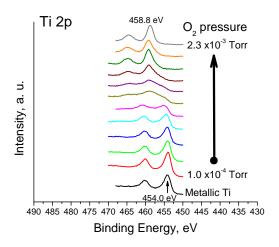
<sup>1</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM

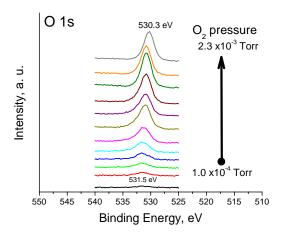
<sup>2</sup>Universidad de Guadalajara

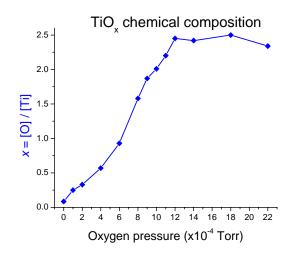
\* H. Tiznado; tiznado@cnyn.unam.mx

Palabras clave: thin films, nucleation, XPS

Materials like HfO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub> and TiO<sub>2</sub> are considered as the most promising high-K gate dielectrics for advanced complementary metal—oxide—silicon applications. However, they have a poor barrier to oxygen diffusion during high temperature post-processing, which causes equivalent oxide thickness (EOT) scaling and reliability concerns<sup>[1]</sup>. In this work we have carried an in situ XPS study of the chemical composition during the growth of  $TiO_x$  thin films deposited by the magnetron sputter deposition technique. It was used a Ti target and a mixture of Ar and O<sub>2</sub> as the chemical precursors. It was determined a set of conditions where the chemical composition is controlled by varying of the O<sub>2</sub> pressure. The maximum oxygen content was O/Ti= 2.5. It also was performed the analysis of the XPS spectra collected at several points during the growing of other films by the technique of QUASES-Tougaard<sup>[2]</sup> revealing interesting data regarding the island nucleation behavior.







**Acknowledgments.** This work was supported by CONACyT-Mexico (project 83275) and DGAPA-UNAM (projects IN-107508 and IN114209-3).

#### Referencias

- [1] Kang et al, Appl. Phys. Lett. 84, 1588 (2004).
- [2] S. Tougaard, QUASES: Software Package for Quantitative XPS/AES.

# Characterization of metallic corrosion at indoor conditions in the electronics manufacturing industry in arid zones.

López G.<sup>1,2,3</sup>, Tiznado H.<sup>2</sup>, Soto G.<sup>2</sup>, De La Cruz W.<sup>2</sup>
<sup>1</sup>Centro de Investigacion Cientifica y de Educacion Superior de Ensenada-CICESE
<sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnologia- CNyN-UNAM, Ensenada
<sup>3</sup>Engineering School University of Baja California, Mexicali BC.

#### Keywords Corrosion, electronic devices, electrical failures, atmospheric corrosion

Aggressive environments that enhance indoor corrosion in industrial plants decrease the yielding of electronic equipment. Atmospheric pollutants mainly sulphur oxides, penetrating through small crevices and holes into electronic plants in combination with climatic factors such as humidity and heat, promote corrosion. This paper presents an analysis of corrosion rate of metals used in electronic devices as a function of temperature, humidity and the concentrations of some air pollutants and a case performed on electronic devices that use copper metal in electrical contacts that exhibited electrical failures during summer and winter in an arid zone as is Mexicali city in order to predict the optimal conditions preventing or minimizing corrosion. The period of exposure of metallic probes of copper was from 2005 to 2007 in indoor of electronic plants. The standard ASTM G 31 method was applied to determine corrosion rate. EDX and AUGER analysis were performed to determine the bulk constituents. The EDX spectra showed that the metallic probes of cooper contain sulphur and copper. Auger elemental surveys yield information exhibited sulphur and copper on the top 5 to 40 angstroms of material. The obtained results have shown that the presence of even small concentrations of air pollutants promoted corrosion processes when time of wetness conditions was reached. The study was carried out in order to minimize dead times due to corrosion in electronic plants located in arid zones.

# Determinación de la nanoestructura de Alanina sobre Cu{311}

L. Morales de la Garza<sup>\*1</sup>, S. Driver<sup>2</sup>, S. Karakastani<sup>2</sup>, D.A. King<sup>2</sup>

 <sup>1</sup> Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Apdo. Postal 356, C.P. 22800, Ensenada, Baja California, México.
 <sup>2</sup> University of Cambridge, Department of Chemistry, Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, United Kingdom.

Palabras clave: DFT, LEED, Cálculos de Primeros Principios

Se estudió la superestructura formada por la adsorción de alanina, [NH<sub>2</sub>-CH(CH<sub>3</sub>)-COOH], sobre la superficie cristalina de Cu{311} por medio de Difracción de Electrones de Baja Energía, (LEED, Low Energy Electron Difraction) asistido por fibra óptica y por cálculos de primeros principios por el método de la Funcional de Densidad, DFT (Density Funtional Theory).

En la técnica de LEED asistida por Fibra Óptica se emplean corrientes de haz del orden de nanoamperios lo que permite estudiar estructuras sensibles al daño electrónico producido por el haz de electrones al incidir sobre la superficie.

El mejor modelo obtenido fue en el que la Alanina forma una superestructura ordenada [2,1;1,2] sobre Cu{311} con un cubrimiento de 1/3 de monocapa.

**Agradecimientos.** L. Morales de la Garza agradece el apoyo económico de la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) de la UNAM durante mi estancia sabática en la Universidad de Cambridge, en el Reino Unido.

#### Referencia.

[1] Surface Science, 600, (2006), L224

<sup>\*</sup> Autor a contactar; L. Morales de la Garza. e-mail: leonardo@cnyn.unam.mx

# Model for metal surface coating: DFT studies on adsorption of furan derivatives over $Fe_n$ clusters (n = 1-4)

E. Montiel <sup>1</sup>, N. Jayanthi<sup>2</sup>, M. A. Veloz <sup>1</sup>, T. Pandiyan <sup>\* 3</sup> and J. Cruz <sup>\* 1</sup>

<sup>1</sup> Investigaciones Químicas y ciencias de la Tierra, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Unidad Universitaria, Km 4.5 Carretera Pachuca-Tulancingo, C.P. 42184

Pachuca-Hidalgo, México.

<sup>2</sup>División de Ingeniería en Informática, Universidad Politécnica del Valle de México, Av. Mexiquense, Tultitlan, Estado de México, CP 54910, México

\* Corresponding authors. E-mail addresses: pandiyan@servidor.unam.mx (T. Pandiyan). Tel: (01) 52-55-5622-34-99

Keywords: Furan derivatives, DFT, iron cluster, corrosion inhibition.

Atomic clusters are studied widely not only because they can own unique properties due to the nanosized effect but also because they represent an intermediate stage in the transition from small molecules to solids. A systematic study on the structures and properties of clusters as a function of size could give information on the transition from clusters to bulk and determine at what size a cluster can mimic the bulk solid at least to some extent. Adsorption capability of furan derivatives 2-furfurylamine, 2-furfuryl alcohol and 2-furfuryl mercaptan with different iron-clusters was studied by DFT. The results show that since the compounds possess suitable structural and electronic parameters for the metal adhesion, it is found that the functional group (NH<sub>2</sub>, OH and SH) of furan derivatives strongly adsorb over the metal clusters. Moreover, the calculated binding energy supports the existence of a bond between furan derivatives and metal, consisting of the transfer of high charge density which present in the delocalization region of furan ring to the metal (L  $(\sigma) \rightarrow$  Fe). The binding nature of the compounds is then confirmed in the molecular orbital studies by detecting the overlap of HOMO (furan ring and functional group) with LUMO (iron).

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, México D.F., C.P 04510, México.

# Reflectancia óptica de películas delgadas de nitruro de aluminio depositadas por ablación láser

F. Chalé-Lara<sup>1,4</sup>, M.H. Farias<sup>2</sup>, C. Huerta-Escamilla<sup>3</sup>, M. Xiao<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, C.P. 22800, México.

<sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 365, Ensenada CP 22800, Baja California, México.

<sup>3</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Km. 103 Carretera Tijuana–Ensenada, C.P. 22800, Ensenada, Baja California, México.

<sup>4</sup>CICATA-IPN Unidad Altamira, Km. 14.5 Carretera. Tampico-Puerto Industrial CP 89600, Altamira, Tamps, México.

\*fchale@cnyn.unam.mx:

Palabras clave: Nitruro de aluminio, ablación láser, reflectancia óptica.

Los semiconductores III-V han sido durante los últimos años un área de intensa investigación debido a sus aplicaciones en la optoelectrónica. En particular el AlN tiene un interés mayor por tener un ancho de banda prohíbida de 6.2 eV. En el presente trabajo se depositaron películas de AlN sobre substratos de silicio (111), utilizando la técnica de ablación láser en el sistema de crecimiento Riber LDM-32. La temperatura del substrato fue controlada a temperatura ambiente y a 600°C. Para el depósito de las películas se utilizó un láser pulsado de KrF (248 nm), con una frecuencia de disparo de 5Hz y la potencia del pulso láser de 200 mJ. El blanco utilizado para el depósito de las películas fue aluminio de alta pureza (99.999%). La presión de nitrógeno fue variada de 0 a 100 mTorr. Se realizó caracterización in-situ mediante XPS y REELS y, de manera ex-situ, por difracción de rayos X y reflectancia óptica. Para los análisis XPS y REELS se utilizó un analizador de electrones Mac-3 de la marca CAMECA. Las mediciones de reflectancia óptica fueron realizadas con un espectrómetro de la marca OceanOptics y utilizando una fuente de luz incoherente. Se prepararon dos series de muestras (M1 y M2) variando la densidad del pulso láser. En los difractogramas de la serie M1 se observa la presencia de la fase hexagonal del nitruro de aluminio y picos que corresponden a presencia de aluminio metálico, en la serie M2 a temperatura ambiente se observó la presencia del plano correspondiente a la fase hexagonal y una pequeña proporción de la fase metálica, mientras que para una temperatura de 600°C solo se tiene presente la fase hexagonal, desapareciendo la parte metálica. Los espectros de reflectancia presentan un comportamiento diferente para ambas series de películas, la M1 reporta un comportamiento asociado a la presencia de aluminio metálico en la superficie, mientras en la segunda serie el espectro óptico de reflectancia muestra un comportamiento que corresponde a una superficie dieléctrica.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen por su apoyo técnico a J.A. Díaz, E. Aparicio, I. Gradilla, J. Peralta, M. Sáenz, E. Medina, A. Tiznado, J. Palomares y C. González. Este trabajo fue financiado por los proyectos DGAPA IN111508-3 y CONACYT 50203-F.

## Influencia de las condiciones de crecimiento sobre las propiedades de reflectancia óptica en películas delgadas de nitruro de berilio depositadas por ablación láser

F. Chalé-Lara<sup>1,4</sup>, M. H. Farías<sup>2</sup>, C. Huerta-Escamilla<sup>3</sup>, M. Xiao<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, C.P. 22800, México.

<sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 365, Ensenada CP 22800, Baja California, México.

<sup>3</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Km. 103 Carretera Tijuana–Ensenada, C.P. 22800, Ensenada, Baja California, México.

<sup>4</sup>CICATA-IPN Unidad Altamira, Km. 14.5 Carretera. Tampico-Puerto Industrial CP 89600, Altamira, Tamps, México.

\*fchale@cnyn.unam.mx:

Palabras clave: Ablación láser, reflectancia óptica, nitruro de berilio

El estudio y producción de materiales semiconductores con ancho de banda prohibida en la región del ultravioleta se ha estado desarrollando ampliamente, debido a su potencial para el desarrollo de aplicaciones en dispositivos de iluminación y comunicación. En los últimos años materiales semiconductores con nanoestructuras como nanowires y nanowhiskers han generado mucho interés por sus posibles aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos a escalas manométricas. En el presente trabajo se depositaron películas de nitruro de berilio usando el sistema RIBER LDM-32. Las películas fueron depositadas sobre substratos de silicio (111), utilizando la técnica de ablación láser. La presión de nitrógeno se mantuvo constante a 25 mTorr para todas las películas. Para el depósito de las películas se utilizó un láser pulsado de KrF (248 nm), con una frecuencia de disparo de 5Hz y la potencia del pulso láser de 200 mJ. El blanco utilizado para el depósito de las películas fue berilio de alta pureza (99.9%). Se realizó caracterización in-situ mediante XPS y, de manera ex-situ por difracción de rayos X, Microscopía electrónica de barrido y reflectancia óptica. Las mediciones de reflectancia óptica fueron realizadas con un espectrómetro de la marca OceanOptics y utilizando una fuente de luz incoherente. Se depositaron películas de nitruro de berilio a temperatura de 25, 200,400, 600 y 700°C, en todas estas películas se observaron espectros de reflectancia óptica muy similares, mostrando cierto comportamiento metálico, sin embargo películas depositadas a temperatura ambiente y posteriormente tratadas térmicamente a 700°C exhiben un comportamiento dieléctrico.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen por su apoyo técnico a J.A. Díaz, E. Aparicio, I. Gradilla, J. Peralta, M. Sáenz, E. Medina, A. Tiznado, J. Palomares y C. González. Este trabajo fue financiado por los proyectos DGAPA IN111508-3 y CONACYT 50203-F.

# Propiedades electrónicas del óxido de nitruro de boro: un estudio teórico computacional

E. Chigo Anota<sup>1</sup>, H. Hernández-Cocoletzi<sup>1,\*</sup>, M. Salazar Villanueva<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ingeniería Química, BUAP, Avenida San Claudio y 18 sur s/n CU

San Manuel, Edificio 149 Puebla 72570, México

<sup>2</sup> Facultad de Ingeniería, BUAP, Avenida San Claudio y 18 sur s/n CU

San Manuel, Edificio 149 Puebla 72570, México

\*Autor a contactar; e-mail: heribert@sirio.ifuap.buap.mx.

Palabras clave: Superficies, Nitruros, Cálculos de Primeros Principios

En este trabajo presentamos un estudio *ab-initio* de las propiedades electrónicas del cúmulo de óxido de nitruro de boro. Utilizamos una estructura del tipo CnHn (coroneno) para simular esta hoja atómica similar al óxido de grafeno [1]. Los calculus fueron llevados a cabo utilizando el formalismo de la Teoría de las Funcionales de la Densidad en la Aproximación de la Densidad Local. Reportamos la geometría optima, los parámetros de reactividad química y la diferencia entre el orbital desocupado más bajo y el orbital ocupado más alto.

**Agradecimientos.** Este trabajo ha sido apoyado parcialmente por VIEP-BUAP (No. CHAE-ING08-I), FIQ-BUAP y el CONACyT México, proyecto # 83982.

#### Referencias

[1] J. J. Hernández Rosas, M. Salazar Villanueva, A. Escobedo-Morales, E. Chigo Anota, enviado a *Rev. Mex. Fís.* (2009).

## Estudio teórico de la adsorción de InN sobre la superficie (0001) de GaN

H. Hernández-Cocoletzi <sup>1,\*</sup>, Gregorio H. Cocoletzi <sup>2</sup>, Noboru Takeuchi <sup>3</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ingeniería Química, BUAP, Avenida San Claudio y 18 sur s/n CU

San Manuel, Edificio 149 Puebla 72570, México

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla

72570, México

<sup>3</sup> Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México. \* Autor a contactar; e-mail: heribert@sirio.ifuap.buap.mx.

Palabras clave: Superficies, Nitruros, Cálculos de Primeros Principios

Durante más de diez años, los nitruros han atraído la atención de los investigadores debido a sus importantes aplicaciones; han sido utilizados para fabricar diódos emisores de luz y láseres, entre otros dispositivos. En general, los nitruros son crecidos en la fase estable de la wurtzita, aunque también es posible hallar la estructura de la zinc blenda metaestable. Recientemente, el InN se ha estudiado intensamente debido a sus potenciales aplicaciones, sin embargo, aún es difícil crecerlo con alta calidad debido que los actuales procesos de crecimiento aún no son completamente satisfactorios. En este sentido, se requiere investigar los mecanismos de crecimiento en los procedimientos utilizados de ahora, así como la exploración de nuevas metodologías para controlar las características de crecimiento de este material. Motivados por estos hechos, en este trabajo utilizamos calculos de primeros principios, teoría de las funcionales de la densidad (DFT), para investigar los mecanismos básicos de crecimiento del InN, en particular, la adsorción y difusión de átomos de In y N sobre la superficie (0001) del GaN. La superficie fue modelada con una geometría de bloque repetido, cada bloque consiste de cuatro bicapas de GaN y un átomo en la superficie superior. La superficie inferior se saturó con átomos de pseudohidrógeno, mientras que los bloques sucesivos fueron separados por un espacio libre. Los átomos de hidrógeno y la capa más baja de GaN se fijaron para simular el bulto. Las otras bicapas y los átomos adsorbidos se les dió la libertad de moverse. La estructura atomic más estable ás estable corresponde a la configuración T4. Estudios similares han sido realizado en un trabajo previo por uno de los autores [1].

**Agradecimientos.** Este trabajo ha sido apoyado parcialmente por el CONACyT México, proyecto # 83982.

#### Referencias

[1] Noboru Takeuchi, "Adsorption and difusión of Ga and N adatoms on GaN surfaces: Comparing the effects of Ga coverage and electronic excitation", Phys. Rev. B, Vol. 72, pp 115307-1 – 115307-5, (2005).

### Estudio de las Características Estructurales y Electrónicas del Nitruro de Zinc

Fabian Herrera Rodríguez <sup>1</sup>, J. M. Quintana Melgosa, <sup>1</sup> Ma. Guadalupe Moreno Armenta <sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Baja California; Fac. de Ciencias Químicas e Ingeniería; Tijuana, B. C. México<sup>1</sup>
<sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM, Ensenada, B. C. México<sup>2</sup>

Autor a contactar: fabianherreral17@hotmail.com

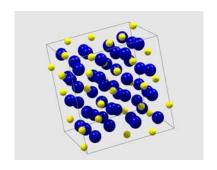
**Palabras clave**: Cálculos de Primeros Principios, nitruro de zinc, óxido de zinc, semiconductores.

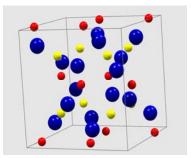
Los compuestos del zinc son muy investigados, debido a sus significativas propiedades. El óxido de zinc (ZnO), es un semiconductor con banda prohibida directa de alrededor de 3.2 eV [1], ha recibido la atención durante mucho tiempo por sus aplicaciones: como dispositivos ópticos, sensores de gas, electrodos conductores trasparentes, dispositivos optoelectrónicos con emisión en el intervalo de longitudes de onda cortas y ventanas ópticas, usadas en celdas solares. Actualmente la investigación del nitruro de zinc ( $Zn_3N_2$ ) se ha incrementado motivado por aplicaciones potenciales en la ingeniería de dispositivos [2].

Por ejemplo los nanoalambres de  $Zn_3N_2$  presentan emisión en el azul [3]. Este compuesto puede ser oxidado para obtener oxinitruros de zinc con lo cual se puede modificar la banda prohibida de ambos compuestos ( $ZnO \ y \ Zn_3N_2$ ) obteniendo nuevas propiedades.

En este trabajo se realizaron cálculos *ab initio* para el volumen, la energía total y las propiedades estructurales y electrónicas del compuesto:  $Zn_3N_2$ , como una variante del mismo se realizaron los mismos cálculos para los compuestos Oxinitruro de Zinc ( $Zn_6N_3O_1$ ) y ( $Zn_3NO$ ).

Como primera parte se estudio el compuesto  $Zn_3N_2$ , del cual ya existen trabajos reportados [4-5]. Posteriormente el trabajo está enfocado a estudiar los cambios electrónicos que ocurren en la red del Nitruro de Zinc al ir incorporando el oxigeno. Se estudiaron sus propiedades electrónicas, esto es con la finalidad de analizar los cambios que ocurren en el sistema conforme se sustituyen oxígenos por nitrógenos ( $Zn_6N_3O_1$ ) y ( $Zn_3NO$ ).





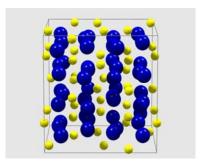


Fig.1 Nitruro de zinc

Fig. 2 Oxinitruro de Zinc (Zn<sub>3</sub>NO) Fig. 3 Nitruro de Zinc

**Agradecimientos.** Al Centro de Supercómputo DGSCA-UNAM. A los proyectos DGAPA IN108908 y CONACYT 89768.

### **Referencias:**

- [1] Xin-Li GUO, Jae-Hyoung CHOI, Hitoshi TABATA and Tomoji KAWAI, Jpn. J. Appl. Phys. Vol 40, L177-L180 (2001).
- [2] M. Futsuhara, K. Yoshioka, O. Takai, Thin Solid Films 322 274–281. (1998).
- [3] F. Zong, H. Ma, J. Ma, W. Du, X. Zhang, H. Xiao, F. Ji, C. Xue, Appl. Phys. Lett., 87, 233104 (2005).
- [4] R. Long, Y. Dai, L. Yu, B. Huang, S. Han Thin Solid Films, 516, 1297-1301 (2008)
- [5] Run Long, Ying Dai, Lin Yu, Meng Guo, and Baibiao Huang, J. Phys. Chem. B, 111 (13), 3379-3383 (2007)•

# Partículas bi-metálicas Au-M (M=Al, Ru, Co, Rh, Ir, Pd) interactuando con O<sub>2</sub> y CO.

M. Ugalde<sup>1</sup>, Reyna Caballero<sup>2</sup>, E. Chavira<sup>1</sup>, Carlos Quintanar<sup>2\*</sup>.

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, AP 70-360, 04510 México, D. F., MEXICO.

<sup>2</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, 04510 México, D. F., MEXICO.

\* Carlos Quintanar cqs@fciencias.unam.mx

Palabras clave: partículas bi-metálicas, centro de color, teoría del funcional de la densidad.

En este trabajo se investiga la estructura electrónica de las partículas bi-metálicas M-Au, y la interacción de estas con una molécula de oxígeno y una de monóxido de carbono M-Au-O-O-C-O (M = Al, Ru, Rh, Ir, Pd, Pt); cuando esta partícula se encuentra libre o adsorbida en la superficie (100) del óxido de magnesio, anclada a un centro de color F<sub>s</sub> (vacancia de oxígeno con dos electrones). Para este estudio se empleo la teoría del funcional de la densidad y un método de cúmulos empotrados. En este trabajo determinamos las trasferencias de carga entre la partícula bi-metálica y la molécula de oxígeno. Determinamos también, la geometría de la partícula M-Au y M-Au-O-O-C-O, así como los cambios estructurales producidos por la adsorción de esas partículas en el centro de color. Los resultados muestran una notable transferencia de carga entre el átomo M y el átomo de oro. También se observa una transferencia de carga de la superficie de MgO a la partícula. Finalmente, en algunos casos se observa un elongamiento del enlace de la molécula de oxígeno, lo que sugiere el rompimiento de la molécula O<sub>2</sub> y la oxidación de CO a CO 2.

**Agradecimientos.** PAPIIT-UNAM IN113509-3 y Proyecto Universitario de Tecnología Ambiental PUNTA-UNAM.

# Síntesis y caracterización de polvos nanoestructurados de ZnO obtenidos en medio polialcohólico para aplicación en sensores

M.-A. Flores-González<sup>1</sup>, M. Villanueva-Ibáñez<sup>1</sup>, M.-A. Hernández-Pérez<sup>2</sup>, H. J. Dorantes-Rosales<sup>2</sup>, P. Rivera-Arzola<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratorio de Nanotecnología y Bioelectromagnetismo Aplicado- Universidad Politécnica de Pachuca, Pachuca-Cd. Sahagún Km 20, ex-Hda. de Santa Bárbara 43830, Zempoala, Hidalgo. México.

<sup>2</sup> Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, ČP 07738, Mexico D.F., México.

\* Autor a contactar; e-mail: flores@upp.edu.mx

Palabras clave: ZnO, poliol, cerámicos nanoestructurados.

**Resumen.** El óxido de zinc (ZnO) es uno los materiales más ampliamente estudiados de la familia de los semiconductores con amplia gama de aplicaciones tecnológicas [1]. Actualmente existen diversos métodos para su preparación, como por ejemplo atomizaciónpirólisis, depósito químico, sol-gel, etc [2]. Sin embargo, existe un creciente interés por obtener polvos cerámicos con características controladas ya que se conoce que el tamaño influye en las propiedades de los materiales. Este trabajo, en su primera etapa, propone la elaboración de ZnO por precipitación controlada en medio polialcohólico. Se realiza un estudio comparativo del óxido de zinc obtenido por el método poliol usando dos diferentes precursores, una sal inorgánica (Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) y una sal orgánica (Zn(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>) disueltos en dietilen glicol (DEG). La caracterización estructural por difracción de rayos X (XRD) de los materiales así obtenidos y tratados térmicamente a 700°C muestra la fase hexagonal tipo wurzita del ZnO. Observaciones en microscopía electrónica de transmisión (MET) y difracción electrónica indican una buena cristalización con tamaños de cristal menores a 20 nm. Las condiciones de síntesis así como los materiales precursores y las cinéticas de reacción, han permitido sintetizar y agregar nanopartículas para generar nanoestructuras en forma de polvos submicrométricos cuyos tamaños pueden variar desde 50 hasta 500 nm. Finalmente se conformaron pastillas del material para el estudio de sus propiedades eléctricas.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen a CONACyT (clave: 104861) por el apoyo económico otorgado para el desarrollo de este trabajo.

### Referencias

[1] S.M. Abrarov, Sh. U. Yuldashev, S.B. Lee, T.W. Kang, J. Lum. **109**, 25 (2004).

[2] U. Ozgur, Y.I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M.A. Reshchikov, J. Appl. Phys. 98, 041301 (2005).

# Nueva aproximación en la obtención de nanoestructuras tipo perovskita vía poliol

M. Villanueva-Ibáñez<sup>1</sup>, M.-A. Flores-González<sup>1</sup>, M.-A. Hernández-Pérez<sup>2</sup>, H.J. Dorantes-Rosales<sup>2</sup>, P.N. Rivera-Arzola<sup>1</sup>, N. Daniel Pérez<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratorio de Nanotecnología y Bioelectromagnetismo Aplicado - Universidad Politécnica de Pachuca, Pachuca-Cd. Sahagún Km 20, ex-Hda. Santa Bárbara 43830, Zempoala.

<sup>2</sup> Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, CP 07738, Mexico D.F., México.

\* Autor a contactar; e-mail: villanueva@upp.edu.mx

Palabras clave: poliol, perovskitas, nanoestructuras

**Resumen.** Los materiales tipo perovskita (ABO<sub>3</sub>) son de gran interés tecnológico debido a sus propiedades de ferroelectricidad, piezoelectricidad, comportamiento óptico no lineal, etc, en donde éstas dependerán del elementos A y B que contengan en su estructura [1]. Para la elaboración de estos materiales se han empleado diversos métodos (sol-gel, reacción en estado sólido, conversión por chispa anódica, etc) en donde regularmente resulta difícil la obtención de fases puras. En el presente trabajo se muestran los primeros resultados obtenidos de la síntesis de hafnato de bario (BaHfO<sub>3</sub>) tipo perovskita. Los hafnatos, como el hafnato de bario, son materiales masivos tradicionalmente preparados por medio de reacciones a altas temperaturas de alrededor de 1000 a 1500 °C obtenidos a partir de sus correspondientes óxidos o carbonatos de los elementos A y B [2]. En este estudio, se presenta por primera vez la obtención de BaHfO<sub>3</sub> por el método poliol en donde las sales empleadas fueron el cloruro de hafnio y el nitrato de bario y di-etilen glicol (DEG) como medio de reacción. El material obtenido fue recuperado, secado y tratado térmicamente a 700°C. Se realizó la caracterización estructural preliminar de estos materiales, apreciándose por difracción de rayos X (DRX) y por microscopía electrónica en transmisión (MET) que se obtiene minoritariamente BaHfO<sub>3</sub> en fase ortorrómbica de tipo perovskita y una fase mayoritaria de HfO<sub>2</sub> monoclínica. Luego de un replanteamiento de síntesis y de precursores (cloruro de hafnio por oxicloruro de hafnio), los resultados obtenidos por DRX y MET muestran que la fase mayoritaria es la del BaHfO<sub>3</sub> ortorrómbico. Observaciones en microscopía electrónica de barrido (MEB) indican la presencia de agregados submicrométricos del orden de 300 nm Adicionalmente a la caracterización estructural se ha realizado la determinación de sus propiedades eléctricas.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen el apoyo económico de CONACyT (clave: 104861) para el desarrollo de este trabajo.

### Referencias

[1] A. Hoffman, Z. Phys. Chem., 28, 74 (1935)

[2] J.P. Schreckenbach, N. Meyer, G. Marx, B.T. Lee, W.M. Kriven, Appl. Surf. Sc. 205, 97 (2003).

# Determinación de la capacidad de biosíntesis de nanopartículas de cobre y paladio mediante el hongo filamentoso *Neurospora crassa*.

Acedo-Valdez, M. R.<sup>1</sup>, Vilchis-Nestor A. R.<sup>2</sup>, Avalos-Borja, M. <sup>3</sup> y Castro-Longoria, E.<sup>4</sup>

Actualmente el estudio de nanopartículas ha despertado gran interés para la ciencia y la industria. Existen diferentes métodos físico-químicos para la obtención de nanopartículas, sin embargo recientemente se han explorado métodos biológicos, entre cuyas ventajas podemos citar el bajo impacto ambiental, no se requieren condiciones especiales de temperatura y presión, y son ampliamente versátiles. Neurospora crassa es un hongo que ha sido considerado modelo de muchas investigaciones. En este trabajo se explora la posibilidad de utilizar a este organismo para la biosíntesis de nanopartículas metálicas de cobre y paladio. Se utilizaron como precursores el cloruro de cobre (II) (CuCl<sub>2</sub>) y acetato de paladio (II) (Pd(O<sub>2</sub>CCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) a tres diferentes concentraciones cada compuesto (10<sup>-2</sup>, 10<sup>-3</sup>, 10<sup>-3</sup> <sup>4</sup>) en series de tiempo de 6, 12 y 24 hs de incubación. La biomasa micelial experimentó un cambio de coloración de amarillo pálido al azul verde claro durante la exposición al cloruro de cobre (II) y a rojo marrón en el caso del acetato de paladio (II). Este cambio de color indicó la posible formación de nanopartículas. Mediante los análisis de espectroscopía UV-Vis, microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopía de dispersión de energía (EDS) y microscopía electrónica de transmisión (TEM) se comprobó que N. crassa fue capaz de sintetizar nanopartículas de cobre y paladio. Mediante el análisis de espectroscopía UV-vis se observó que la reducción de iones fue óptima a partir de una concentración de 10<sup>-</sup> <sup>3</sup> M en ambos metales.

Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad de Sonora (DICTUS), Universidad de Sonora. <sup>2</sup>Centro de Investigación en Química Sustentable, Universidad Autónoma del Estado de México (CIQS-UAEM), México. <sup>3</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM).
 <sup>4</sup>Centro de Investigación Científicamente y Educación Superior de Ensenada, CICESE. Autor para correspondencia. ecastro@cicese.mx

# Structural and magnetic properties of Cu-Co nanoparticles prepared by mechanochemical synthesis

G. Alvarez<sup>1,\*</sup>, J. Angeles-Islas<sup>2</sup>, H. Montiel<sup>3</sup>, H. A. Calderón<sup>2</sup> and R. Zamorano<sup>2</sup>

**Keywords**: Mechanical Alloying; Nanoparticles; Magnetic Properties.

In the present work, we report the synthesis of nanoparticles of Cu-Co with 5, 20 and 50% at Co, which are obtained by the reduction reaction between metallic chlorides in solid state, CuCl2+CoCl2+4Na Cu/Co+4NaCl, and that these are activated via the mechanical synthesis in a mill SPEX-D8000 of high energy. Additionally, NaCl is added as an environment to disperse the particles, and obtaining sizes below 5 nm; and that these are dependent on the time of the alloyed mechanic.

The nanoparticles are characterized by X-Ray diffraction (DRX), these indicate a reduction of the lattice parameters, and these suggest the formation of a solid solution between both metals. The images of electronic microscopy of high-resolution (HR-TEM) show his morphology (Fig.1) and also they indicate a homogeneous distribution of sizes. The previous results show that this synthesis method is useful for obtaining of nanoparticles with an alone metallic component, but it is also useful in the synthesis of particles in a solid solution.

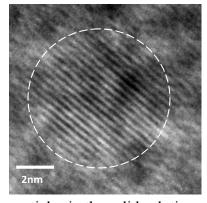


Fig. 1. HR-TEM image of nanoparticles in the solid solution of Cu-Co with 20 % at Co.

A study of vibrant sample magnetometry (VSM) shows a typical magnetic response, that it is characteristic of a solid solution formed by nanometric particles [1]. These results show a

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Depto. de Materiales Metálicos y Cerámicos, IIM, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F., 04510, México.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Depto. Ciencia de Materiales, ESFM, Instituto Politécnico Nacional, Ed. 9 UPALM, México 07338 México D.F. México.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Depto. de Tecnociencias, CCADET, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F., 04510, México.

<sup>\*</sup>Author to contact; e-mail: <u>memodin@yahoo.com</u>.

narrow relation with the spectra of non-resonant microwave absorption, see Fig. 2, which are obtained in an electron paramagnetic resonance (EPR) spectrometer modified [2]; where this non-resonant signal is associated with magnetic order of the material [3]. Also, we compare the results for Cu and Co particles, which are synthesized by the same procedure, with the nanoparticles of the solid solution in order to highlight differences.

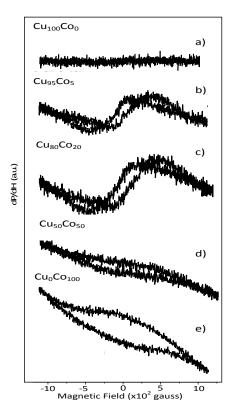


Fig. 2. Non-resonant microwave absorption spectra for nanoparticles of Cu (a) and Co (e), and the solid solution of Cu-Co (b-d).

**Acknowledgments.** G. Alvarez acknowledges a postdoctoral fellowship from UNAM-Mexico. The authors thank the support from project of complementary support for SNI-1 of CONACyT-Mexico (No. 89780) and the project PAPIIT-UNAM No. IN116608.

### References

- [1] Xu Fan, et al. Phys. Rev. B **69**, 094432 (2004).
- [2] G. Alvarez and R. Zamorano, J. Alloys Compd. 369, 231 (2004).
- [3] G. Alvarez and H. Montiel, *Magnetosensitive techniques based on modulated microwave power absorption for detection of phase transitions*, in: Israel Betancourt (Ed.), Magnetic Materials: Current Topics in Amorphous Wires, Hard Magnetic Alloys, Ceramics, Characterization and Modeling, Research SignPost, Kerala, India, 2007.

# Funcionalización superficial de nanopartículas de metales nobles con aminoácidos y evaluación de sus propiedades ópticas

D. L. Guzmán Reyes<sup>1</sup>, E. Avalos Marrón<sup>1</sup>, R. Patakfalvi<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de los Lagos

\* Autor a contactar; e-mail: rpatakfalvi@culagos.udg.mx

**Palabras clave**: nanopartículas de metales nobles, aminoácidos, modificación superficial, plasmón superficial

Entre las partículas metálicas, la plata y el oro son los metales más estudiados debido a sus propiedades únicas así como a las aplicaciones de las mismas.

Las aplicaciones analíticas están basadas en la banda de absorción característica del plasmón superficial de las nanopartículas de metales nobles. La posición de absorbancia máxima depende de la carga superficial así como del ambiente de las partículas, favoreciendo que las nanopartículas sean usadas como sensores.

En este trabajo se presentan las preparaciones de nanopartículas de plata, oro y sus aleaciones en medio acuoso usando NaBH<sub>4</sub> o citrato de sodio como agentes reductores y citrato de sodio como estabilizador.

Para la modificación superficial de las nanopartículas fueron utilizados aminoácidos (cisteina, ácido glutámico, etc.) y péptidos (glutamina). Modificando el pH, la protonación de los grupos carboxilos y aminos de los aminoácidos cambia. En el punto isoeléctrico la molécula es neutra porque el número de las cargas positivas y negativas es igual. Entre las nanopartículas metálicas puede existir una fuerza atractiva debido a las cargas opuestas de los aminoácidos adsorbidos. Así, las nanopartículas de plata y oro dependen en su tamaño del pH, que se refleja en un cambio en la banda plasmónica [1].

El cambio de las propiedades ópticas y la agregación de las partículas fueron detectados con espectroscopia UV-visible y TEM. Fueron estudiadas cómo dependen la estabilidad y las propiedades ópticas de las nanopartículas de metales nobles en medio acuoso modificando las concentraciones de metal, aminoácidos o modificando el pH de la disolución.

**Agradecimientos.** D. L. G. R. y R. P. agradece a CONACyT por su apoyo, a través del proyecto 90534.

### Referencias

[1] A. Majzik, R. Patakfalvi, V. Hornok, I. Dékány, Gold Bulletin 42, 113 (2009).

# Biosíntesis de nanopartículas de platino mediante el hongo filamentoso Neurospora Crassa.

Moreno-Velásquez, S. D.<sup>1</sup>, Vilchis-Nestor A. R.<sup>2</sup>, Avalos-Borja, M.<sup>3</sup> y Castro-Longoria, E.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad de Sonora (DICTUS), Universidad de Sonora. <sup>2</sup>Centro de Investigación en Química Sustentable, Universidad Autónoma del Estado de México (CIQS-UAEM), México. <sup>3</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). <sup>4</sup>Centro de Investigación Científicamente y Educación Superior de Ensenada, CICESE. Autor para correspondencia. ecastro@cicese.mx

El desarrollo de procesos biosintéticos para la formación de nanomateriales es un tema de gran interés en la actualidad. Existe un gran número de métodos físicos y químicos comúnmente empleados, sin embargo presentan desventajas como el uso de grandes cantidades de energía y/o la generación de residuos tóxicos y empleo de reactivos peligrosos. Por otro lado, la síntesis de materia inorgánica por medio de sistemas biológicos esta caracterizada por procesos que ocurren a temperaturas y presiones ambientales, son ecológicamente amigables y los procesos de bioreducción y pasivación no requieren del uso de reactivos adicionales. En el presente trabajo se determinó la capacidad de biosíntesis de nanopartículas de platino del hongo filamentoso Neurospora crassa. El experimental se desarrolló con una mezcla de sales precursoras de ácido hexacloroplatínico (H<sub>2</sub>PtCl<sub>6</sub>) a tres diferentes concentraciones (10<sup>-2</sup>, 10<sup>-3</sup>, 10<sup>-4</sup>) y tiempos de reacción (6, 12 y 24 h). Al exponer la biomasa micelial a las soluciones precursoras de platino se observó un cambio de color de amarillo pálido a una coloración café oscuro sugiriendo la formación de nanopartículas. La presencia de nanopartículas de platino fue confirmada mediante los análisis de espectroscopía UV-Vis, microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopía de dispersión de energía (EDS) y microscopía electrónica de transmisión (TEM).

# Nano and micro reoriented domains and their relation with the crystal structure in the new ferroelectric Fe Zn B O Cl Boracite

S. Ulloa-Godínez<sup>1,5</sup>, A. Barrera<sup>2</sup>, I. Rosales<sup>3</sup>, L. Bucio<sup>3</sup>, F. F. Castillón<sup>4</sup>, M.H.

Farias<sup>4</sup>, J.M. Siqueiros<sup>4</sup> & J. Campa-Molina

<sup>1</sup>Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingeniería, Universidad de Guadalajara, Laboratorio de Materiales Avanzados del Departamento de Electrónica. Av. Revolución No.1500, Módulo O, Planta baja, S.R. C.P. 44840, Guadalajara, Jalisco, México. <sup>2</sup>Centro Universitario de la Ciénega, Universidad de Guadalajara, Laboratorio de Materiales.

Av. Universidad No. 1115, Colonia Linda Vista, C.P. 47840, Ocotlán, Jalisco, México. 

<sup>3</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 
C.P. 01000 México, D. F., México.

<sup>4</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 356, C.P. 22800, Ensenada, Baja California, México.

<sup>5</sup>Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California, Blvd. Benito Juarez s/n col. Insurgentes, Mexicali, Baja California, México.

Autor a contactar; e-mail: <u>jcampa@daad-alumni.de</u>.

Key Words: Nano and micro domains, New boracite. Ferroelectric, Crystal Structure

A new iron-zinc chlorine boracite  $Fe_{1.5}Zn_{1.5}B_7O_{13}Cl$  has been grown by a chemical transport reaction in closed quartz ampoules at 1173 K [1]. The crystal structure was characterized by X-ray powder diffraction (XRD) using the Rietveld refinement method [2] and belongs to the trigonal/rombohedral system with cell parameters a = 8.5726(1) Å, c = 21.0116(4) Å, V = 1337.26(3) Å, Z = 6 and space group R3c (No. 161), this is shown in figure 1. Ferroelectric nano and micro reoriented domains were found in this material using polarizing optical microscopy (PLM), scanning (SEM) and transmission electron microscopy (TEM) [3-5], this is illustrated in figure 2.

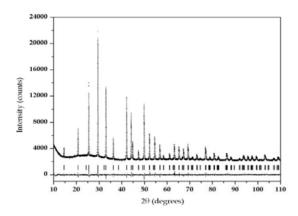


Figure 1. Observed (crosses), calculated (solid line) and difference (solid line at the bottom) from the final Rietveld refinement of the X-ray powder diffraction data of Fe<sub>1.5</sub>Zn<sub>1.5</sub>B<sub>7</sub>O<sub>13</sub>Cl mixed boracite at room temperature. Vertical marks correspond to the positions allowed for the Bragg reflections.

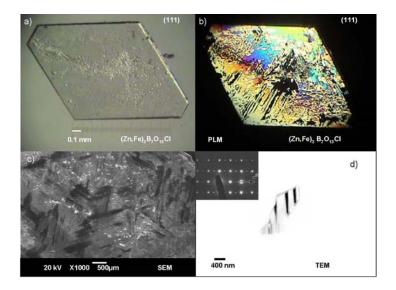


Figure 2. (a) Platelet cut and polished from as-grown crystal parallel to a naturally formed (111) facet for  $Fe_{1.5}Zn_{1.5}B_7O_{13}Cl$  for PLM and SEM measurements. (b) The PLM image shows strongly birefringent lamellae oriented approximately along [100]. (c) Microdomain structure as observed by SEM. The microdomain structures are parallel to (100). (d) TEM bright-field image of spike-like nanodomains are oriented along [100] in  $Fe_{1.5}Zn_{1.5}B_7O_{13}Cl$  boracite. The incident electron beam is closely parallel to [001]. The examination by TEM showed that in the trigonal phase of  $Fe_{1.5}Zn_{1.5}B_7O_{13}Cl$  Clnanodomainstructuresexist.

**Acknowledgments.** The authors thank José Carlos Carballo-Bastida from Cicese-Ensenada, Mexico for his valuable technical support. This work was supported by CONACyT. Mexico project 101797 (CB-2008-01)

### **References:**

- [1] Schmid, H. (1965). Die Synthese von Boraziten mit Hilfe chemischer Transportreaktionen. J. Phys. Chem. Solids, 26, 973–988.
- [2] Rodríguez-Carvajal J 1981 FULLPROF program for Rietveld refinement and pattern matching analysis (unpublished). The program is a strongly modified version of that described by D B Wiles, R A Young J. Appl. Crystallogr. 14 149
- [3] Campa-Molina J., Ulloa-Godínez S., Barrera A., Bucio L. and Mata J (2006). Nano and micro reoriented domains and their relation with the crystal structure in the new ferroelectric boracite Zn3B7O13Br. J. Phys.: Condens. Matter 18, pp. 4827–4837
- [4] Schmid, H. (1992). Polarized light microscopy (PLM) of ferroelectric and ferroelastic domains in transmitted and reflected light. Ferroelectric Ceramics (ed. by N. Setter), p. 107. Monte Verità, Birkhäusen Verlag, Basel.
- [5] Clin., M., Rivera, J.P. & Schmid, H. (1985). Polarization-optical domain study of the ferromagnetic, ferroelectric/ferroelastic phase of Co<sub>3</sub>B7O<sub>1</sub>3I. Jap. J. Phys. 24, 1054–1056.

# Determinación de la capacidad de biosíntesis de nanopartículas de cobre y paladio mediante el hongo filamentoso *Neurospora crassa*.

Acedo-Valdez, M. R.<sup>1</sup>, Vilchis-Nestor A. R.<sup>2</sup>, Avalos-Borja, M.<sup>3</sup> y Castro-Longoria, E.<sup>4</sup>

Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de la Universidad de Sonora (DICTUS), Universidad de Sonora.
 Centro de Investigación en Química Sustentable, Universidad Autónoma del Estado de México (CIQS-UAEM), México.
 Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM).
 Centro de Investigación Científicamente y Educación Superior de Ensenada, CICESE. Autor para correspondencia. ecastro@cicese.mx

Actualmente el estudio de nanopartículas ha despertado gran interés para la ciencia y la industria. Existen diferentes métodos físico-químicos para la obtención de nanopartículas, sin embargo recientemente se han explorado métodos biológicos, entre cuyas ventajas podemos citar el bajo impacto ambiental, no se requieren condiciones especiales de temperatura y presión, y son ampliamente versátiles. Neurospora crassa es un hongo que ha sido considerado modelo de muchas investigaciones. En este trabajo se explora la posibilidad de utilizar a este organismo para la biosíntesis de nanopartículas metálicas de cobre y paladio. Se utilizaron como precursores el cloruro de cobre (II) (CuCl<sub>2</sub>) y acetato de paladio (II) (Pd(O<sub>2</sub>CCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) a tres diferentes concentraciones cada compuesto (10<sup>-2</sup>, 10<sup>-3</sup>, 10<sup>-3</sup> 4) en series de tiempo de 6, 12 y 24 hs de incubación. La biomasa micelial experimentó un cambio de coloración de amarillo pálido al azul verde claro durante la exposición al cloruro de cobre (II) y a rojo marrón en el caso del acetato de paladio (II). Este cambio de color indicó la posible formación de nanopartículas. Mediante los análisis de espectroscopía UV-Vis, microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopía de dispersión de energía (EDS) y microscopía electrónica de transmisión (TEM) se comprobó que N. crassa fue capaz de sintetizar nanopartículas de cobre y paladio. Mediante el análisis de espectroscopía UV-vis se observó que la reducción de iones fue óptima a partir de una concentración de 10<sup>-</sup> <sup>3</sup> M en ambos metales.

# Cúmulos de oro y plata como catalizadores de crecimiento epitaxial de GaN por CVD.

Gregorio Guadalupe Carbajal Arízaga<sup>1,\*</sup>, Karina Viridiana Chávez Hernández<sup>1</sup>, Rafael García Gutierrez<sup>2</sup>, Oscar Edel Contreras López<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología. Universidad Nacional Autónoma de México. Apdo. Postal 356, C.P. 22800. Ensenada, Baja California, México. <sup>2</sup>Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Hermosillo, Sonora.

Palabras clave: Nanociencia, GaN, Cúmulos de oro

El nitruro de galio (GaN) es un compuesto con propiedades optoelectrónicas adecuadas para utilizarse en dispositivos semiconductores de alta eficiencia. Entre las técnicas comunes para crecer GaN, está el depósito por vapores químicos (CVD, por sus siglas en inglés) de amoniaco y galio metálico como precursores. Un elemento esencial para el crecimiento ordenado del GaN es el catalizador depositado sobre el substrato. Este debe ser un metal, que bajo las condiciones de la síntesis permita la miscibilidad de los precursores. De esta manera, el catalizador puede ser seleccionado de un diagrama ternario de miscibilidad que incluya el galio, el nitrógeno y el metal a utilizar [1]. Las características del galio formado, dependerán del tamaño de las partículas del metal catalizador introducido.

En este trabajo, capas delgadas de oro y plata se depositaron sobre sustratos limpios de silicio (111) mediante la evaporación del metal en una cámara de vacío. Las muestras fueron tratadas de dos maneras: i) recocidas en una mufla para inducir la formación de islas o cúmulos [2]; ii) recocidas directamente en un horno a 1100 °C con la presencia de los reactivos necesarios para crecer nitruro de galio que son galio metálico, amoniaco (NH<sub>3</sub>) y cloruro de amonio (NH<sub>4</sub>Cl) [3, 4]. Las muestras se trataron durante 1 y 2 horas.

La formación de islas de plata fue monitoreada después del tratamiento térmico del substrato con la película de plata a 350, 500 y 700 °C. En la muestra tratada a 350 °C se observó una disrupción de la película de plata que llevó a la formación de partículas de tamaño uniforme con 80 nm de diámetro. Aumentando la temperatura a 500 °C, además de las partículas de 80 nm, hay otras de aproximadamente 150 nm de diámetro. Dado que esto representa el doble del tamaño de las partículas iniciales, se infiere que el aumento de la temperatura indujo la coalescencia de partículas por pares (las de 80 nm). La coalescencia de las partículas se confirma con el tratamiento a 700 °C en donde es posible observar partículas con diámetros de 300 nm, quedando aún algunas de las partículas iniciales de 80 nm y otras de 150 nm.

La espectroscopia UV-vis en el modo de reflectancia no detectó la banda correspondiente al plasmon de la plata en la muestra tratada a 350 °C. Sin embargo, dicha banda aparece clara a 512 nm en la muestra recocida a 500 °C y se desplaza a 585 nm con el tratamiento a 700 °C. El desplazamiento a un valor de menor energía (red shift) está

<sup>\*</sup> Autor a contactar; e-mail: gregoriocarbajal@yahoo.com.mx

asociado al aumento de tamaño de las partículas [5]. Otro de los factores pudiera ser la morfología de las partículas, pero este factor es despreciable en estos experimentos, ya que las partículas presentan la misma forma.

Una vez que se sabe que la película de plata genera cúmulos de mayor tamaño a mayor temperatura y que este comportamiento también se presenta en películas de oro [2], no se repitieron los mismos experimentos con las películas de oro, sino que sólo se recoció a 700 °C en una mufla. La imagen de SEM mostró una superficie irregular sin la formación definida de cúmulos. Cuando el substrato con la película se colocó directamente en un reactor CVD y se recoció bajo la presencia de NH<sub>3</sub>, galio metálico y NH<sub>4</sub>Cl, después de una hora de reacción apareció una serie de hexágonos con dimensiones entre 140 y 450 nm. Por las dimensiones de las partículas se propone que los primeros cúmulos son de 140 nm y se unen con cúmulos vecinos generando cúmulos de valores múltiplos (aprox. 280 nm y 460 nm).

A pesar de que la espectroscopía EDS realizada de manera puntual sobre las partículas hexagonales revela oro como único componente, su morfología puede depender del GaN que comienzan a formarse, ya que el oro no forma cristales de este tipo. El hecho de que el oro tenga una masa atómica mayor que el galio, favorece que su espectro de EDS sea más intenso e impida la detección del galio. Cuando este mismo substrato se somete a la reacción de CVD por dos horas, una serie de hilos con alto contenido de galio (EDS) crece a partir de las partículas de oro.

En conclusión, la formación de partículas de oro o plata sobre Si(111) es viable por simple recocimiento y su tamaño depende de la temperatura. En el caso de partículas de oro, las partículas adquieren morfología hexagonal que pueden estar perpendiculares a la superficie del substrato y a partir de ahí direccionan el crecimiento del compuesto de galio en forma de hilos.

**Agradecimientos.** A los técnicos Israel Gradilla (SEM) y Eloisa Aparicio (DRX), a DGAPA-UNAM. También se agradece el apoyo al proyecto PAPIIT No. IN101509.

### Referencias

- [1] X. Duan, Ch. M. Lieber. J. Am. Chem. Soc. **122**, 188 (2000).
- [2] Ch.Y. Chang, S.J. Pearton, P.J. Huang, G.Ch. Chi, H.T. Wang, J.J. Chen, F. Ren, K.H. Chen, L.Ch. Chen. Appl. Surface Sci. **253**, 3196 (2007).
- [3] D.Ehrentraut, Y. Kagamitani, Ch. Yokoyama, T. Fukuda. J. Cryst. Growth 310, 891 (2008).
- [4] R. Garcia, A.C. Thomas, F.A. Ponce, J. Cryst. Growth **310**, 3131 (2008).
- [5] 5 Z.J. Jiang, Ch.Y. Liu, Y. Liu. Appl. Surface Sci. 233, 135 (2004).

# Desarrollo de un reactor de lecho fluidizado bidireccional para el procesamiento de polvos.

G. Soto<sup>\*</sup>, H. Tiznado Universidad Nacional Autónoma de México \* e-mail: gerardo@cnyn.unam.mx.

Palabras clave: Polvos, Experimentos, Reactor de lecho fluidizado.

Los reactores de lecho fluidizado son en general mucho más eficientes que los reactores de lecho estático para procesar materiales en estado sólido [1]. Su diseño básico data de principios del siglo pasado, siendo ampliamente utilizados en procesos de combustión de carbón en centrales termoeléctricas. Es de extrañar entonces que esta arquitectura no haya sido aprovechada en todo su potencial para muchas aplicaciones donde son requeridas reacciones en estado sólido. Es por ello que en este trabajo se presenta el avance y la evaluación de una unidad prototipo de laboratorio de un reactor de lecho fluidizado para el procesamiento de polvos. En nuestro diseño combinamos la tecnología de lecho fluidizado con la asistencia de calentamiento por microondas. El reactor que se diseña consiste de un tubo de cuarzo al vacio colocado en un horno de microondas comercial casero. En el interior del tubo se coloca el polvo que se desea procesar, alimentando un gas fluidizador por una entrada, con su respectiva salida de evacuación para el bombeo. La innovación con respecto a los diseños convencionales es que nuestro reactor permite la conmutación de la dirección del flujo en forma dinámica, haciendo posible mantener el polvo en estado fluidizado por tiempos muy prolongados sin necesidad de etapas de filtración, extracción y/o recuperación. Creemos que nuestra implementación permitirá procesar polvos de nano-dimensiones en forma altamente eficaz. Se presenta la construcción, características de diseño, y validación de algunas corridas de prueba. Por ejemplo, se han depositado nanorecubrimientos y nano-partículas de plata y nitruro de tantalio en polvos de sílice/alúmina de 50 µm. Creemos que este tipo de tecnologías serán requeridas en el futuro para procesos de activación, manejo y desactivación de nano-polvos.

**Agradecimientos.** Se agradece la colaboración de A. Tiznado, E. Medina, J. Valenzuela, M. Herrera, J. Heiras y W. de la Cruz.

### Referencias

[1] Werther, Joachim and Hartge, Ernst-Ulrich (2003) "Modelling of Fluidized Bed Reactors," **International Journal of Chemical Reactor Engineering**: Vol. 1: P1.

# Síntesis *in situ* de nanopartículas de plata en microgeles termosensibles

T. E. Lara-Ceniceros<sup>1,\*</sup>, L. Licea-Jiménez<sup>1</sup>, U. Márquez-Lamas<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Centro de investigación en Materiales Avanzados, S. C.-Unidad Monterrey

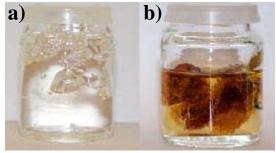
<sup>2</sup> Instituto Tecnológico de Zacatecas-División Metal-Mecánica.

\* e-mail: tania.lara@cimav.edu.mx

Palabras clave: nanopartículas de plata, polímeros termosensibles, PNIPAM, SEM.

Una serie de microgeles termosensibles han sido sintetizados vía polimerización radicálica en medio acuoso. Se trata de microgeles de copolímeros basados en poli(NIPAMco-AS). También se estudió el efecto de la cantidad de agente entrecruzante (MBA) utilizado en la polimerización para variar el grado de entrecruzamiento. Una vez purificados los microgeles se sintetizaron in situ nanopartículas de plata (AgNP's) mediante una reducción de las sales de plata (AgNO<sub>3</sub>) con NaBH<sub>4</sub>. Las AgNP's han demostrado ser materiales antibacterianos, además de ser amigables desde un punto de vista ambiental. [1] Se propone que el uso del AS promueven sitios de interacción con los grupos amida de la NIPAM, [2] delimitando físicamente los "nanoreactores" donde se lleva a cabo la reducción de las sales de plata para la obtención de sus correspondientes nanopartículas. Al mismo tiempo se propone que la obtención de nanopartículas de menor tamaño pueden ser obtenidas empleando un hidrogel altamente entrecruzado, esto fue corroborado por análisis de microscopía electrónica de barrido (SEM). Los hidrogeles a base de PNIPAM, son un excelente material termosensible que presenta cambios repentinos en respuesta a estímulos externos, tales como: pH, temperatura, fuerza iónica, campo eléctrico, entre otros. Este hidrogel presenta una separación de fases (LCST) a 33°C<sup>[3]</sup>, lo cual repercute en cambios perceptibles de volumen en el hidrogel, además pueden ser considerados como "microreactores" en la polimerización de monómeros hidrófobos<sup>[4]</sup>.

En la Figura 1 se muestran una fotografía de los microgeles antes y después del proceso de reducción (tratamiento con NaBH<sub>4</sub>) para la formación *in situ* de las AgNP's. Como se puede observar, los microgeles estabilizados en la solución de AgNO<sub>3</sub> no presentan coloración alguna, pero al ser inmersos en la solución reductora se produce una coloración café de los microgeles, esto es un indicativo de la formación de las nanopartículas de plata. Se estudió un tiempo de reducción de 30 min. Las muestras son codificadas como sigue: MG1-T1, MG2-T1 y MG3-T1 (para un tiempo de inmersión en NaBH<sub>4</sub> de 30 min).



**Figura 1.** Microgeles: a) equilibrados en AgNO<sub>3</sub> y b) inmersos en NaBH<sub>4</sub> (obtención *in situ* de AgNP's).

Para corroborar el tamaño y forma de las AgNP's se realizó un análisis de microscopía. En la Figura 2a-c se presentan las micrografías de SEM para MG1-T1, MG2-T1 y MG3-T1, donde se puede apreciar una morfología tipo esférica de las AgNP's y una dispersión en la matriz reticulada relativamente buena, pero diferentes en tamaño. El tamaño de las AgNP's en MG1-T1 se centraron en aproximadamente 7.5 nm, las de MG2-T1 en 15 nm y las de MG3-T1 en 32 nm. Al mismo tiempo se encontró que el número de nanopartículas aumenta al disminuir la densidad de entrecruzamiento.

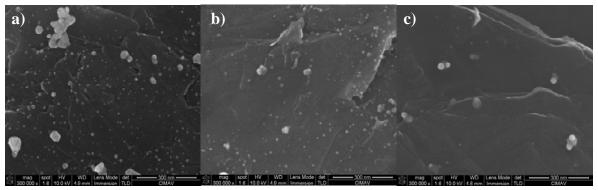


Figura 2. Micrografías de SEM de: a) MG1-T1, b) MG2-T1 y c) MG3-T1.

En conclusión, se logró la obtención de AgNP's *in situ* en microgeles termosensibles P(NIPAM-co-AS) mediante un método de síntesis sencillo, con una buena dispersión de ellas en la matriz reticulada polimérica y sin uso de algún estabilizante externo. La forma de las AgNP's fueron esféricas, pero con variaciones al aumentar el tiempo de reducción de las sales de plata. Los microgeles con mayor densidad de entrecruzamiento (altamente entrecruzados) permitieron la obtención de AgNP's de menor tamaño, lo cual indica que la densidad de entrecruzamiento está directamente relacionada al tamaño de los "nanositios" generados en el microgel y al tamaño de las AgNp's (ya que éstos delimitan a la vez el tamaño de las nanopartículas generadas).

**Agradecimientos.** Al CONACYT, por el apoyo económico otorgado a través de la convocatoria 2008 "Apoyos Complementarios para la Consolidación Institucional de Grupos de Investigación" en la Modalidad de Retención con número de apoyo **176040**.

### Referencias

- [1] C. H. Ho; J. Tobis; C. Sprich; R. Tomann; J. C. Tiller, Adv. Mater. 16, 957 (2004).
- [2] Y. M. Mohan; T. Premkumar; K. Lee; K. E. Geckeler, Macromol. Rapid Commun. 27, 1346 (2007).
- [3] K. Haraguchi; .T. Takehisa; S. Fan, Macromolecules 35, 10162 (2002).
- [4] J. Mrkic; B. Saunders, J. Coll. Int. Sci. 222, 75 (2000).

# A new red-emitting La<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>Sr<sub>2</sub>AlO<sub>5</sub> phosphor prepared by combustion synthesis

C. E. Rodríguez-García<sup>1</sup>, E. M. Tejeda<sup>2</sup>, F.F. Castillón<sup>2</sup> and G.A. Hirata<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Physics of Materials Graduate Program, CICESE-UNAM, Km 107 Carretera TijuanaEnsenada, No. 3918, Zona Playitas Ensenada, B. C., 22860 México.

<sup>2</sup> Center of Nanoscience and Nanotechnology UNAM. Km 107 Carretera Tijuana-Ensenada.

Ensenada, B. C., México 22860

\* ceduardo@cnyn.unam.mx

**Key words**: Nanomaterials, luminescence, red-emitting.

New red luminescent powders of La<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>Sr<sub>2</sub>AlO<sub>5</sub> (x = 0.01) were prepared by combustion synthesis (CS) method with post-annealing treatment. Microstructural properties were characterized using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM) and transmission electron microscopy (TEM). Luminescent and optical properties were studied by photoluminescence (PL) and diffuse reflectance spectroscopy. We found that the XRD pattern of La<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>Sr<sub>2</sub>AlO<sub>5</sub> powders show a tetragonal phase which is structurally similar EuSr<sub>2</sub>AlO<sub>5</sub> (# JPDS 70-2197). The surface morphology of the grains are triangle-faceted of about 250 nm in size and nanobars of 100 nm in length. PL analysis revealed two narrow emission peaks located at  $\lambda_{em1}$  = 497 nm (greenish) and  $\lambda_{em2}$ = 620 nm (red) which correspond to the  ${}^{3}P_{0} \rightarrow {}^{3}H_{4}$  and  ${}^{1}D_{2} \rightarrow {}^{3}H_{4}$  trivalent praseodymium transitions. Using  $\lambda_{ex}$ = 287 nm produces a higher intensity emission of 620 nm peak. The absorbance spectrum show a broad absorption with a maximum around 280 nm, this is in agreement with the excitation peak in the PL spectrum located at  $\lambda_{ex}$ = 287 nm

**Acknowledgements:** The authors thanks to E. Aparicio, Israel Gradilla, Margot Saenz, F. Ruiz, and E. Flores for their technical help.

### References

- [1] Won Bin Im *et al.* Applied Physics Letters 93, 091905 (2008).
- [2] Ozuna O. and G. A. Hirata. Applied Physics Letters, 84, 8 (2004).
- [3] Perrin W. and William H. T. CRC Handbook of Metal Etchants. 1(1991).
- [4] Blasse G. Structure and Bonding 26:23 (1976).
- [5] Aumüller G.C. et al J. Phys. Chem Solids 55,8,767-772 (1994).

# Síntesis y Funcionalización de Nanopartículas de Oro como Medio Suministrador de Fármacos

M.C. Ramírez-Camacho<sup>1,\*</sup>, A. Susarrey-Arce<sup>2</sup>, N. Bogdanchikova<sup>2</sup>, M. Avalos<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Maestria en Ciencias e Ingeniería con especialidad en Nanotecnología-UABC,

Km 107 carretera Tijuana-Ensenada, 22800, Ensenada, México

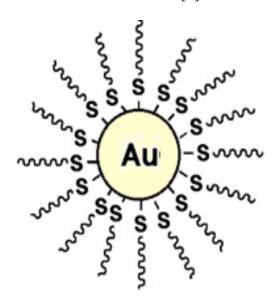
<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM

Km 107 carretera Tijuana-Ensenada, 22800, Ensenada, México

\*M.C. Ramírez-Camacho; maycecilia07@gmail.com

Palabras clave: Coloide, Oro, Nanotransportadores de Fármacos.

Actualmente el desarrollo de los materiales nanoestructurados ha sido uno de los campos de investigaciones tecnológicas más relevantes en cuestiones biomédicas ya que tiene gran aplicación para fines de diagnostico y tratamiento de enfermedades [1]. Han surgido recientemente nanotransportadores que proporcionan un tema novedoso en el área de transporte de principio activo o fármaco. Durante la década pasada varios vehículos transportadores han sido designados basándose en diferentes nanomateriales, tales como polímeros, dendrímeros, liposomas, nanopartículas de metales nobles. La aplicación de nanopartículas de oro como transportadores ha sido estudiando intensamente debido a facilidad de su estudio por métodos ópticos, su inactividad, muy baja toxicidad, y simplicidad de síntesis y facilidad de reproducibilidad [2]. Nanopartículas de oro reducidas y estabilizadas con citratos tienen carga superficial negativa y parar convertirse en un transportador se requiere funcionarizarse con moléculas que contienen los grupos tioles, amino o difenilfosfina [3].



En este trabajo se sintetizaron y funcionarizaron nanopartículas de oro mediante la reducción de HAuCl<sub>4</sub> por método Turkevich [4] que utiliza citrato de sodio como reductor y estabilizador. Después las nanopartículas fueron funcionarizadas aminoácidos: cisteína y dipéptido (cisteína-glicina). Preparando las nanopartículas para el transporte de principio activo se investigaron las características físico-químicas de nanotransportador sintetizado: estabilidad, tamaño, morfología y carga de partículas antes y después de funcionalización. Para esta objetivo se aplicaron métodos físico-químicos: espectroscopia UV-VISIBLE, TEM, método de Potencial Z, etc.

**Agradecimientos.** Agradecemos a F. Ruíz, E. Flores, I. Gradilla, por su apoyo técnico, J. Cornejo

por su disponibilidad del equipo de potencial Z en la caracterización de las muestras. M.

Saenz, J. Peralta por la facilidad de cómputo; a CONACYT (Proyecto 79062) y PAPIIT-UNAM (proyecto IN100908) por el apoyo financiero.

### Referencias

- [1] Orit S.; Simonnet C., et al, The Journal of Neuroscience, 26 (2006) 6119.
- [2] Partha G.; Vincent M.R., et al, Advanced Drug Delivery Reviews, 60 (2008) 1307
- [3] Andreaa Majzik., et al, Gold Bulletin, 42 (2009) No. 2.
- [4] Turkevich, J.; Stevenson, P. C.; Hillier J., Discuss. Faraday Soc., 11 (1951) 55

# Crecimiento de varillas de GaN sobre zafiro inducido por cúmulos de oro en un sistema CVD.

Gregorio Guadalupe Carbajal Arízaga<sup>1,\*</sup>, Karina Viridiana Chávez Hernández<sup>1</sup>, Rafael García Gutierrez<sup>2</sup>, Oscar Edel Contreras López<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología. Universidad Nacional Autónoma de México. Apdo. Postal 356, C.P. 22800. Ensenada, Baja California, México.

<sup>2</sup>Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Hermosillo, Sonora.

\* Autor a contactar; e-mail: gregoriocarbajal@yahoo.com.mx

Palabras clave: Nanociencia, GaN, Cúmulos de oro, zafiro.

El nitruro de galio (GaN) es un compuesto con propiedades optoelectrónicas útiles en dispositivos emisores y detectores de luz azul. Uno de los desafíos actuales es controlar su crecimiento epitaxial, como sería el caso de formación de varillas. El interés por estudiar materiales con estas estructuras unidimensionales radica en que sus propiedades difieren de las del compuesto con crecimiento tridimensional [1]. Las varillas de GaN pueden crecerse mediante el usó de cúmulos de oro depositados sobre un substrato. En el presente trabajo se depositó una película de oro sobre un substrato de zafiro mediante la evaporación térmica del oro en una cámara de vacío. Posteriormente el substrato se introdujo a un reactor CVD. El precursor de galio se generó in situ con cloruro de amonio y galio metálico. Después de una hora de reacción, con el substrato colocado a 3.0 cm de la fuente de galio, únicamente se observaron cúmulos de oro de forma circular con radios de 130 a 190 nm (verificado por SEM y EDS). Aumentando una hora más de reacción, aparecieron partículas circulares con diferente contraste con tamaños de 130 nm, que son semejantes a los cúmulos encontrados en la primera hora de reacción, junto a otros con tamaño de hasta 250 nm, que pudieron haber surgido de la fusión de cúmulos pequeños. Después de tres horas de reacción se aproximó el substrato a 0.7 cm de la fuente de galio, logrando crecer varillas de hasta 16 um de longitud con grosores que van desde los 140 nm (parecido al radio de los cúmulos de oro iniciales) hasta los 330 nm. Por difracción de rayos X se confirma claramente que las varillas tienen la estructura hexagonal del GaN.

**Agradecimientos.** Se Agradece la asistencia técnica de Eloisa Aparicio (DRX), Francisco Ruiz (TEM) e Israel Gradilla (SEM). G.G.C.A. agradecela beca posdoctoral a DGAPA-UNAM, así como al proyecto PAPIIT No. IN101509.

### Referencias

[1] S.Y. Bae, H.W. Seo, J. Park, H. Yang, B. Kim, Appl. Phys. Lett. **376**, 445 (2003).

# Optical properties of ZnO nanoparticles on the porous structure of mordenites and ZSM-5 zeolites

A. Susarrey-Arce<sup>1,\*</sup>, V. Petranovskii<sup>1,\*</sup>, M. Herrera-Zaldívar<sup>1</sup>, M. A. Hernández-Espinosa<sup>2</sup>, R. Portillo<sup>3</sup> and W. De La Cruz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CNYN-UNAM, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada, B.C., México

<sup>2</sup>Departamento de Investigación en Zeolitas y Posgrado de Ciencias Ambientales del Instituto de Ciencias de la Universidad Autónoma de Puebla, México

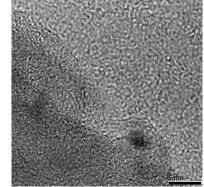
<sup>3</sup>Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México

\* Corresponding Authors. E-mails: arturosusarce@yahoo.com.mx, vitalii@cnyn.unam.mx

**Keywords**: Mordenite, ZSM-5, Zeolites, ZnO, Nanoparticles, Cathodoluminescence.

ZnO nanoparticles within a size range below 2 to 10 nm have been grown on ZSM5 and mordenite zeolite hosts with different SiO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> molar ratios (MR). XRD revealed that (110), (020), (200) and (310) zeolite planes participated in the ionic exchange and ZnO formation.

XPS measurements suggest ZnO grew over ZSM5 and mordenites. Cathodoluminescence (CL) study probe ZnO nanoparticles emission in approximately 3.1, 2.8 and 2.5 eV, associated with the ZnO band edge emission, with a blue related-defects emission and oxygen vacancies emission respectively. Diffuse reflectance using Kubelka-Munk theory suggest the ZnO nanoparticles absorption band gap at 3.3 to 3.4 eV approximately in ZSM5 and mordenite support. The generation of point defects in ZnO/zeolite interface



explains the presence of this blue band [1-4]. A pore distribution study by Density Functional Theory (DFT) method and BET measurements, reveals that ZnO nanoparticles grown mainly in the zeolite mesoporosity [5].

**Acknowledgements.** Thanks are given to I. Gradilla, E. Aparicio, F. Ruiz, M. Sainz, J. Peralta, T. Kreztchmar, M. Vega and E. Flores for their technical support. This research was supported by UNAM- PAPIIT Grants IN107208 and IN110608.

### References

- [1] A. Suliman, Y. Tang and L. Xu, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **91**, 1658 (2007).
- [2] C. Hariharam, Appl. Catalysis A: General 304, 55 (2006).
- [3] M. Yang, D. Wang, L. Peng, et al., Sensors and Actuators 117, 80 (2006).
- [4] F.Meneau, G. Sankar, N. Morgante, et al, Nucl. Instr. Meth. B 199, 499 (2003).
- [5] M. A. Hernandez, A. Susarrey-Arce, M. Herrera-Zaldivar, V. Petranovskii et al., Industrial and Engineering Chemistry Research (submitted).

# Síntesis y caracterización de películas delgadas de nitruro de cobre con plata

I. Ponce-Cazares<sup>1,2,\*</sup>, W. De La Cruz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Posgrado en Física de Materiales, Centro de Investigación Científica y Educación Superior de Ensenada, Km 107carretera Tijuana-Ensenada, A.P. 360, C.P. 22860, Ensenada B.C., México.

<sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM, Km 107carretera Tijuana-Ensenada, A.P. 356, C.P. 22860, Ensenada B.C., México.

\*iponce@cnyn.una.mx

Palabras clave: Películas delgadas, nitruro de cobre, XPS.

Hoy en día el desarrollo de nuevos materiales en forma de película delgada es importante en la ciencia e ingeniería de materiales, no sólo por el conocimiento que se adquiere al estudiarlas, sino por sus aplicaciones [1]. Uno de los materiales estudiados en forma de películas delgadas son los nitruros de metales de transición, por ser materiales con muchas aplicaciones tecnológicas [2]. El nitruro de cobre ha atraído mucho la atención como material semiconductor, por sus características optoelectrónicas determinadas por su estructura cúbica tipo anti-ReO<sub>3</sub> [3]. Actualmente, se intenta introducir un átomo de metal de transición en el nitruro de cobre de tal forma que este átomo extra quede en el centro de la celda y, de esta forma cambiar las propiedades ópticas y eléctricas de dicho material [4,5]. En este trabajo se presenta el estudio sobre el comportamiento óptico y eléctrico de las películas delgadas de nitruro de cobre con plata, las películas fueron depositadas sobre substratos de vidrio, y se uso la técnica de pulverización catódica reactiva con magnetrón DC para su síntesis. La caracterización óptica y eléctrica se realizó con la ayuda de la espectrometría Uv-vis y la técnica de cuatro puntas, respectivamente. Estas caracterizaciones mostraron un ancho de banda prohibida en el intervalo de 1.84 a 1.99 eV, y una resistencia de hoja en el intervalo de 0.39 a 2.72 Ωm. Por otro lado, se realizó la caracterización estructural de las películas delgadas mediante difracción de rayos X mostrando un crecimiento preferencial en el plano (111) y de manera in-situ se caracterizó con la técnica de espectroscopía de electrones fotoemitidos, con la cual fue posible determinar las estequiometrías de los depósitos. Los resultados mostraron que fue posible realizar depósitos de Cu<sub>3</sub>N:Ag sin alterar la estructura del Cu<sub>3</sub>N.

**Agradecimientos.** Se agradece al proyecto DGAPA No IN106709 así como al proyecto CONACYT No 50203-F. Los autores también agradecen a D. Domínguez, J. Díaz, A. Tiznado y E. Medina por el apoyo técnico en la construcción del sistema utilizado para los depósitos.

### Referencias

[1] P. W. Anderson, Lectures or the theory of solids, Nueva York 1964;

[2]S.T Oyama, in: S. Ted Oyama (Ed.), 1996, pp. 1–27;

[3] JCPDS-ICSS, International Centre for Diffraction Data, Newtown Square, PA, USA.

[4] C. Gallardo-Vega, W. de la Cruz, 2006, Applied Surface Science 252:8001–8004.

[5] Moreno-Armenta, M.G., William Lopez Perez, Takeuchi, N., 2007, Solid State Sci. 9:166–172.

# Synthesis and characterization of inorganic/polymer multilayers

S.R. Payán<sup>1</sup>, P.-Y. Chen<sup>2</sup>, M.A. Meyers<sup>2</sup>, J. McKittrick<sup>2</sup> and G.A. Hirata<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Materials Science Engineering Program-UNAM, Ensenada, México 22860

<sup>2</sup> Mechanical and Aerospace Engineering, UC-San Diego, La Jolla, CA 92093-0411

<sup>3</sup> Center for Nanoscience and Nanotechnology-UNAM, Ensenada, México 22860

\*spayan@cnyn.unam.mx

**Key words**: Biomaterials, Nanostructured thin films, hard coatings

Abstract. Bioinspired in the abalone shell microstructure we have fabricated inorganic/polymer multistacked layers by combining pulsed laser ablation and magnetron sputtering. Smooth thin polymer (PMMA, Poly-methyl methacrylate) films are grown by laser ablation and alternatively inserted between inorganic layers deposited by DC or RF magnetron sputtering in order to fabricate multi-layers of several biocompatible materials: CaCO<sub>3</sub> (aragonite)/PMMA, ZrO<sub>2</sub>/PMMA ZrN/PMMA and TiO<sub>2</sub>/PMMA, Different substrates such as glass, quartz and crystalline-Si were continuously rotated and heated at 115°C during the formation of the multilayer structures. Smooth polymer thin films are obtained at a laser energy fluence of 80-120 mJ/cm<sup>2</sup> while the inorganic layers are obtained at a magnetron power in the range of 80-150 W. The inorganic films are composed of nanocrystalline or amorphous particles with different degrees of porosity as observed by TEM and AFM. High resolution TEM analysis at the inorganic/organic interface revealed well formed inorganic films which are separated by the polymeric layer (10-50 nm). The hardness values showed an increase for the inorganic film/polymer stacked system as compared with the single film. A more detailed analysis of the results together with AFM/nanoindentation measurements will be presented.

**Acknowledgements:** The authors grateful acknowledge the technical work performed by E. Aparicio, P. Casillas, E. Medina, A. Tiznado, I. Gradilla, F. Ruiz, E. Flores, G. Vilchis and V. Garcia. This research is supported by DGAPA-UNAM (IN-120106-3), ARO Grant W911F-08-1-0461 and NSF Grant DMR 0510138.

# Propiedades magnéticas de nanopartículas de níquel en función de la densidad de las nanopartículas.

C. Gallardo-Vega<sup>1,\*</sup>, L. Cota-Araiza<sup>2</sup>, S. Tougaard<sup>3</sup>, D. Castro<sup>4</sup>, J. Araya-Pochet<sup>4</sup>, W. De La Cruz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada (CICESE), Km 107 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada B.C., México. <sup>2</sup>Centro de Ciencias de la Materia Condensada, Universidad Nacional Autónoma de México, Km 107 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada B.C., México. <sup>3</sup>Department of Physics, University of Odense, DK-5230 Odense M, Denmark. <sup>4</sup>Universidad Nacional de Costa Rica (UCR), Sede "Rodrigo Facio Brenes" Montes de Oca, San José Costa Rica Código Postal 2060.

\* Carlos Alberto Gallardo Vega; e-mail: gallardo@cnyn.unam.mx

Palabras clave: nanopartículas, Ni, ablación láser, XPS, AFM, MOKE

Actualmente la producción y el diseño de nuevos dispositivos tecnológicos está dirigido hacia la reducción de tamaño, por lo tanto se tiene la necesidad de producir nuevos materiales a escala nanométrica  $(1x10^{-10}m)$ , que sean base para la producción de los nuevos dispositivos. En este trabajo se depositaron nanopartículas de níquel por medio de la técnica de ablación láser. Los sustratos utilizados fueron de zafiro. Para evitar la contaminación de las nanopartículas se recubrieron con una delgada capa de carbono en el mismo sistema de depósito. El zafiro utilizado en esta investigación se limpió in-situ en la cámara de crecimiento, antes de depositar las nanopartículas. Cada depósito realizado en este trabajo fue analizado de manera *in-situ* utilizando la espectroscopía de fotoemisión de rayos X (XPS). Los espectros XPS fueron utilizados para la caracterización morfológica utilizando la metodología de QUASES-Tougaard, cuyos resultados fueron corroborados por imágenes obtenidas de manera ex-situ en un microscopio de fuerza atómica (AFM). La caracterización magnética de las muestras se realizó por medio del efecto Kerr magneto-óptico (MOKE). Los resultados de la caracterización morfológica muestran que las nanopartículas depositadas con 200 pulsos de láser presentaron una altura promedio de 5 nm y un recubrimiento de alrededor del 0.8. Además las muestras depositadas a temperatura ambiente tuvieron una mayor densidad de islas (552 islas/um<sup>2</sup>), en comparación con las muestras depositadas a 500°C (224 islas/µm²). Por otro lado, el comportamiento magnético varió en función de las densidad de las nanopartículas, presentando la mayor coercitividad (Hc) la muestra depositada a temperatura ambiente (Hc=121 Oe), mientras que la muestra depositada a 500°C presentó la menor coercitividad (*Hc*=68 Oe).

**Agradecimientos.** Los autores de este trabajo agradecemos de manera especial a J. A. Díaz, V. García - Gradilla, M. Sainz, por su apoyo técnico. Al CONACYT por la beca de doctorado a C. Gallardo, así como el apoyo económico aportado por el proyecto DGAPA IN106709.

# Biosíntesis de nanopartículas bimetálicas de Au/Ag, asistida por el hongo Neurospora crassa

Vilchis-Nestor A.R.<sup>1</sup>, Castro-Longoria E.<sup>2</sup>, Avalos-Borja M<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación en Química Sustentable, Universidad Autónoma del Estado de México (CIQS-UAEM), México. <sup>2</sup>Departamento de Microbiología, Centro de Investigación Científica y de Educación superior de Ensenada (CICESE), Ensenada, México.

<sup>3</sup>Departmento de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México (CNyN-UNAM), México. arvilchisn@uaemex.mx

Resumen. Las aplicaciones potenciales de materiales nanoestructurados en diferentes dispositivos de alto impacto tecnológico, gracias a las propiedades optoelectrónicas y fisicoquímicas particulares de los materiales con dimensiones nanométricas, ha provocado un interés creciente en la nanociencia y nanotecnología. En lo que a la obtención de nanopartículas concierne, hay una creciente necesidad de desarrollar métodos de síntesis alternativos a los métodos físicos que requieren en mayoría de los casos equipo sofisticado o los métodos químicos tradicionales que implican el uso y/o generación de compuestos tóxicos. Los métodos de obtención de nanoestructuras inspirados en sistemas biológicos son limpios, no tóxicos y ambientalmente amigables. En este trabajo se describe una novedosa estrategia biológica para la síntesis de nanopartículas bimetálicas de Au/Ag asistida por medio del hongo filamentoso Neurospora crassa. Se utilizaron tres mezclas de las sales precursoras con diferentes proporciones de AgNO<sub>3</sub> y HAuCl<sub>4</sub> a una concentración de 10<sup>-3</sup>M. La formación de las nanopartículas bimetálicas se lleva acabo vía intracelular como lo demuestran los estudios de TEM y son principalmente de forma esférica. La caracterización de la nanopartículas por HRTEM, SAED y EDS, demuestra que las nanopartículas bimetálicas de Au/Ag son del tipo aleación. Los análisis preliminares del tamaño promedio de nanopartícula para las tres mezclas probadas dieron como resultado 51.5±41.9 nm para Au/Ag (50/50), 35.5±26.6 nm para Au/Ag (30/70) y 21.8±13.6 para Au/Ag (70/30). Estos resultados al parecer indican que el mejor sistema para la obtención de nanopartículas bimetálicas de Au/Ag es el de la proporción 70/30, sin embargo aún está pendiente un análisis más exhaustivo para determinar con mayor precisión el tamaño promedio y así establecer cuál es el mejor sistema.

# Gold and silver metal clusters and nanoparticles stabilization supported in Mordenite type of zeolites

I. Tuzovskaya<sup>1, 2</sup>, A. Susarrey-Arce<sup>1</sup>, N. Bogdanchikova<sup>1,\*</sup>, A. Pestryakov<sup>2</sup>, V. Gurin<sup>3</sup>, M. H. Farías<sup>1</sup> and M. Avalos<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, CP.22800, Ensenada, Baja California, México.

<sup>2</sup>Tomsk Polytechnic University, Lenin ave. 30, Tomsk 634034 Russia. <sup>3</sup>Physico-Chemical Research Institute, BSU, Minsk, Belarus.

**Keywords:** Mordenite, H+-centers, silver, gold, nanoparticles and clusters.

Stabilization of gold and silver metal clusters and nanoparticles (AgAuCN) in a host [1, 2] in particular for NOx reduction for Ag [2] and CO oxidation for Au species [1] have a direct consequence for production of active metal species. Mordenite is a promising candidate for stabilization of small clusters with size less than 0.6 nm, because mordenite porous diameter is ca. 0.6 nm.

In the present work, AgAuCN stabilization was studied by varying the SiO2/Al2O3 molar ratio of mordenite, sample preparation temperature and cation type of mordenite. Stability of AgAuCN during storage in air also was investigated. Comparison between properties

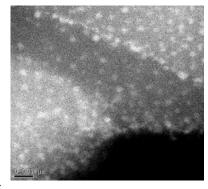


Fig. TEM image of gold small particles on

of samples with two studied metals showed that conditions, when metal clusters are formed, are similar. As a result of a diffusion mechanism, especially in the case of the cluster stabilization inside of the zeolite channel, a confinement effect of acid centers was observed.

**Acknowledgements:** Thanks are given to E. Aparicio, F. Ruiz, M. Sainz, J. Peralta, Mario Vega, I. Gradilla and E. Flores for their technical support. This research was supported by CONACYT project 79062 and PAPIIT-UNAM project IN100908, Mexico.

### References

[1] J. Guzman and B. C. Gates, J. Phys. Chem. B **106** (31), 7659 (2002).

[2] N. Aoyama, K. Yoshida, A. Abe and T. Miyadera, Catalysis Letters 43, 249 (1997).

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Department of Chemistry, Moskow State University, Moskow 119899 Russian Federation. \*Corresponding Author: nina@cnyn.unam.mx

# Síntesis solvotérmica y caracterización de nanoalambres de WO<sub>x</sub>

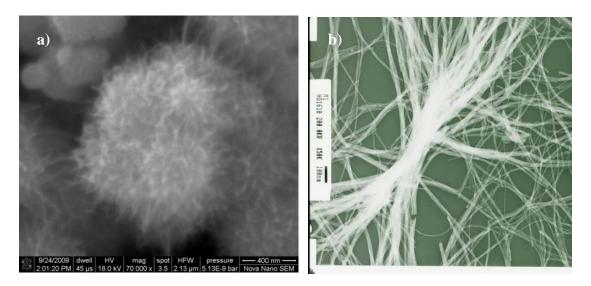
M. Cardoza<sup>1\*</sup>, S. Sepúlveda<sup>2</sup>, A. Olivas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, C.P. 22800. Ensenada B.C., México.

<sup>2</sup> Centro de Innovación, Investigación y Desarrollo en Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Nuevo León, C.P. 66600, Apodaca, Nuevo León, México. \*E-mail: mcardoza@cnyn.unam.mx

Palabras clave: Síntesis solvotérmica, nanoalambres, óxido de tungsteno.

Los óxidos, particularmente los óxidos de metales de transición poseen el más amplio y fascinante rango de propiedades de todas las clases de materiales. De los óxidos metálicos, los óxidos de tungsteno son de gran interés y han sido investigados extensivamente debido a sus prometedoras propiedades físicas y químicas [1-4]. En las últimas décadas han llamado gran atención para la construcción de dispositivos de pantalla plana, ventanas gasocrómicas inteligentes, dispositivos de modulación óptica, dispositivos ópticos de escritura-lectura-borrado, sensores (gas, humedad y temperatura) y emisión de campo, dadas sus excelentes propiedades electrocrómicas, optocrómicas y gasocrómicas [5-8]. Por otro lado, es bien sabido que las nanoestructuras tienen propiedades químicas y físicas únicas y que pueden ser usadas como unidades elementales de dispositivos electrónicos [9,10]. La síntesis de nanoestructuras unidimensionales y su ensamblado en superestructuras ordenadas o en arquitecturas funcionales complejas ofrecen grandes oportunidades para explorar sus propiedades y para la fabricación de nanodispositivos [11-13]. De esta forma, en años recientes se han desarrollado varios métodos para preparar nanoestructuras unidimensionales de óxido de tungsteno. Los métodos de síntesis para la generación de nanoestructuras de óxidos metálicos requieren en la mayoría de los casos condiciones extremas de temperatura (1000-3000°C) y largos tiempos de reacción (desde una hora hasta un mes), así como el empleo de surfactantes, catalizadores, etc., lo cual genera altos costos y procesos de purificación complejos. En este trabajo se llevo a cabo la síntesis de nanoestructuras de óxido de tungsteno utilizando el método solvotérmico que es uno de los más sencillos y efectivos. La síntesis se desarrolló utilizando como precursor WCl<sub>6</sub> y etanol como solvente y variando parámetros importantes como el tiempo de reacción. Así mismo, se realizó la caracterización de los nanoalambres de WOx para determinar su morfología, estructura, composición y estados de oxidación, utilizando diversas técnicas de análisis: microscopía electrónica de barrido (SEM); microscopía electrónica de transmisión (TEM); difracción de rayos X (DRX); espectroscopía de fotoemisión de rayos X (XPS). Se sintetizaron nanoalambres con diámetros de 4-14 nm y varios micrómetros de longitud. La variación del tiempo de reacción generó como resultado la obtención dos fases cristalinas: W<sub>18</sub>O<sub>49</sub> y WO<sub>3</sub>. Utilizando este simple proceso de síntesis es posible controlar la fase cristalina y el diámetro promedio del sistema de nanoalambres de óxido de tungsteno.



**Figura 1.** Imágenes de a)SEM y b) TEM, de nanoalambres de W<sub>18</sub>O<sub>49</sub> obtenidos en este trabajo.

**Agradecimientos.** A Francisco Ruíz, Israel Gradilla, Jesús Antonio Díaz, Eloísa Aparicio, Margot Sainz y Erick Flores por el soporte técnico brindado para la realización de la parte experimental de este trabajo. Al proyecto UNAM PAPIIT IN 107008 por el apoyo financiero brindado.

### Referencias

- [1] Sanrato C, Odziemkowski M, Ulmann M and Augustynski J, J. Am. Chem. Soc. 123 10639 (2001).
- [2] Li Y B, Bando Y S and Golberg D, Adv. Mater. 15 1294 (2003).
- [3] Solis J L, Saukko S, Kish L, Granqvist C G and Lantto V, *Thin Solid Films* **391** 255 (2001).
- [4] Baeck S H, Choi K S, Jaramillo T F, Stucky G D and McFarland E W Adv. Mater. 15 1269 (2003).
- [5] Sanrato C, Odziemkowski M, Ulmann M and Augustynski J, J. Am. Chem. Soc. 123 10639 (2001).
- [6] Huang K, Jia J F, Pan Q T, Yang F and He D Y, *Physica* B **396** 164 (2007).
- [7] Papaefthimiou S, Syrrakou E and Yianoulis P, *Thin Solid Films* **502** 257 (2006).
- [8] Huang K, Jia J F, Pan Q T, Yang F and He D Y, Appl. Surf. Sci. 253 8923 (2007).
- [9] Xia Y N, Yang P Y, Sun Y G, Wu Y Y, Mayer B, Gates B, Yin Y D, Kim F and Yan H Adv. Mater. **15** 353 (2003).
- [10] Patzke G R, Krumeich F and Nesper R, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 41 2446 (2002).
- [11] Gao P. X. and Wang Z. L., J. Phys. Chem. B **106** 12653 (2002).
- [12] Wang D L, Qian F, Yang C, Zhong Z H and Lieber C M, Nano Lett. 4 871 (2004).
- [13] Dick K A, Deooert K, Larsson M W, Martensson T, Seifert W, Wallenberg L R and Samuelson L Nat. Mater. **3** 380 (2004).

# Primeras etapas del crecimiento de nanopartículas de cobalto depositadas sobre $Al_2O_3$ (0001) estudiadas a partir del análisis de la forma de la parte inelástica de un pico XPS.

C. Gallardo-Vega<sup>1,\*</sup>, L. Cota-Araiza<sup>2</sup>, S. Tougaard<sup>3</sup>, W. De La Cruz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada (CICESE), Km 107 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada B.C., México. <sup>2</sup>Centro de Ciencias de la Materia Condensada, Universidad Nacional Autónoma de México, Km 107 Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22860, Ensenada B.C., México. <sup>3</sup> Department of Physics, University of Odense, DK-5230 Odense M, Denmark. \* Carlos Alberto Gallardo Vega; e-mail: gallardo@cnyn.unam.mx

Palabras clave: nanopartículas, Co, ablación láser, XPS.

Resumen. Se realizó un experimento película / sustrato de cobalto a temperatura ambiente sobre un sustrato de zafiro, los depósitos se realizaron por medio de la técnica de ablación láser. La cantidad de material depositado fue controlada por los pulsos de láser utilizados para el depósito. Cada etapa del experimento fue caracterizada in situ por espectroscopia de electrones fotoemitidos de rayos X (XPS). La forma del pico O 1s en la región inelástica fue analizada por medio de la metodología de OUASES-Tougaard, para obtener el modo de crecimiento de las nanopartículas de cobalto. Los resultados señalan que las nanopartículas fueron aumentando su altura de 2 a 8 nm y el recubrimiento de la superficie incrementó simultáneamente desde 0.1 a 0.8, cuando se acumularon 200 pulsos de láser. Posteriormente se realizó una serie de muestras con las condiciones de depósito que garantizaban la presencia de nanopartículas (islas) de cobalto a diferentes temperaturas de sustrato, utilizando temperatura ambiente, 300°C y 500°C. Las muestras depositadas a menor temperatura tuvieron la mayor densidad de islas (452 islas/µm<sup>2</sup>) pero de menor tamaño (~ 2 nm), por el contrario la muestra depositada a mayor temperatura presentó islas de mayor tamaño ( $\sim 8$  nm) pero con menor densidad de islas (80 islas/ $\mu$ m<sup>2</sup>). Estos resultados muestran que al depositar el cobalto en un sustrato con alta temperatura el material tiene mayor movilidad y prefiere agruparse para formar islas de mayor tamaño con menor recubrimiento.

**Agradecimientos.** Los autores de este trabajo agradecemos de manera especial a J. A. Díaz, V. García - Gradilla, M. Sainz, por su apoyo técnico. Al CONACYT por la beca de doctorado a C. Gallardo, así como el apoyo económico aportado por el proyecto DGAPA IN106709.

# Síntesis y Caracterización teórico experimental de nanopartículas de CeO<sub>2</sub>

Jorge Barreto1, M. Ugalde2, Eduardo Muñoz Picone1, Reyna Caballero3, Carlos Quintanar3\*, E. Chavira2, Ernesto Marinero4.

**Palabras clave**: Óxido de cerio, síntesis de nanopartículas de ceria, impurezas y defectos paramagnéticos.

**Resumen.** El óxido de cerio IV (CeO<sub>2</sub>) es usado como catalizador combinado con partículas metálicas para reducir las emisiones de monóxido de carbono (CO<sub>2</sub>) en el ambiente, entre otras muchas aplicaciones.

La fabricaron de las nanopartículas de CeO<sub>2</sub> se elaboraron modificando la técnica de sol-gel polimerizando con acrilamida. Para ello se partió de óxido de cerio, 99.999 %, utilizando una disolución de agua caliente, agua oxigenada y ácido nítrico. Se ajusto el pH, a neutro, agregando hidróxido de amonio. Polimerizando con acrilamida, *N,N*-metilenbisacrilamida, agente entrecruzante; N-N'-Azodiisobutyramidine dihydrochloride, como acelerador para la polimerización.

Mediante difracción de rayos X por el método de polvos, se observo un patrón de CeO<sub>2</sub> que presenta una fase fluorita la cual tiene una simetría cúbica, así como también mostró la presencia de una sola fase.

El estudio de resonancia para-magnética electrónica (RPE), realizado en las muestras nanoestructuradas detecto una señal paramagnética. En el caso del  $CeO_2$  el Ce es 4+ (correspondiente con la estructura del xenón) y el O2- (correspondiente con la estructura del neón) ambos átomos tienen capa cerrada por tanto en RPE no se presentaría ninguna señal sin embargo ocurre lo contrario se observan señales que indican la presencia de impurezas o defectos paramagnéticos en el material. Asimismo se determinó el valor del factor g asociado al electrón en el defecto paramagnético es de g=2.0039 el cual se puede comparar con el factor g del electrón libre (g=2.0023).

Finalmente en un estudio de primeros principios utilizando la teoría del funcional de la densidad (por sus siglas en inglés DFT) se modelaron diferentes impurezas y defectos

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Instituto de Físicas Universidad Nacional Autónoma de México, AP 20-364, 01000 México, D. F., MEXICO.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, AP 70-360, 04510 México, D. F., MEXICO.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, 04510 México, D. F., MEXICO.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Hitachi San Jose Research Center, 3403 Yerba Buena Road, San Jose, CA 95135, USA. \* Carlos Quintanar cqs@fciencias.unam.mx

paramagnéticos en nanopartículas de CeO<sub>2</sub>; con lo cual se trato de encontrar los defectos que producen la señal paramagnética en nuestro sistema

**Agradecimientos.** PAPIIT-UNAM IN113509-3, PAPIIT-UNAM- IN109308 y Proyecto Universitario de Tecnología Ambiental PUNTA-UNAM.

# Micro-nanoláminas de oxido de molibdeno sintetizadas por el método CSVT

A. Martinez-Diaz<sup>1,\*</sup>, F. Chávez<sup>2</sup>, P. Zaca-Morán<sup>2</sup>, E. Sánchez-Mora<sup>1</sup>, O. Goiz<sup>3</sup>, R. H. López<sup>4</sup>, C. Felipe<sup>5,\*</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur Col. San Manuel, 72579, Puebla, México.

<sup>2</sup>Departamento de Fisicoquímica de Materiales, ICUAP, Benemérta Universidad Autónoma de Puebla, 72000, Puebla, México

<sup>3</sup>Departamento de Ingeniería Eléctrica, CINVESTAV, Instituto Politécnico Nacional, 07000, D. F., México

<sup>4</sup>Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco 917, 5700 San Luis, Argentina.

<sup>5</sup>Departamento de Biociencias e Ingeniería, CHEMAD, Instituto Politécnico Nacional, 07340, D. F., México.

\* A. Martinez-Diaz; e-mail: <u>sega\_nada@yahoo.com.mx</u>

\* C. Felipe; e-mail: <u>cfelipe@ipn.mx</u>

Palabras clave: Micro-nanoestructuras, Oxido de molibdeno, CSVT

**Resumen.** El óxido de molibdeno (MoO<sub>3</sub>) es un óxido metálico semiconductor que ofrece una amplia variedad de aplicaciones en muchas áreas de la tecnología, debido a que tiene excelentes propiedades ópticas y electrónicas. Se ha usado por ejemplo en la fabricación de sensores de gases y catalizadores heterogéneos.

En este trabajo se usó la microscopía electrónica de barrido (MEB) con la finalidad de realizar una exploración de la estructura morfológica de un conjunto de nanoestructuras de MoO<sub>3</sub> sintetizadas a diferentes condiciones fisicoquímicas. Las imágenes MEB mostraron, que las micro-nanoestructuras de MoO<sub>3</sub> tenían formas laminares. Dichas micro-nanoláminas, fueron crecidas mediante la técnica de depósito químico a corta distancia en la fase vapor (CSVT, por sus siglas en ingles Close-Spaced Vapor Transport). Esta técnica de síntesis, es una muy buena opción en la ciencia de materiales, para el crecimiento de micro-nanomateriales. Entre las principales virtudes de la técnica, se pueden mencionar: a) su sencillez, b) operar a presión atmosférica, c) trabajar a temperatura moderadas, d) no usar catalizadores ni gases tóxicos y e) ser económica y de fácil montaje en cualquier laboratorio.

**Agradecimientos.** Este trabajo se realizó con el apoyo financiero por parte de la Vicerrectoria de Investigación y Posgrado (VIEP), Secretaria de Investigación y Posgrado (SIP-IPN) el Programa del Mejoramiento del Profesorado (Promep-SEP) y la Red de Fisicoquímica de Sistemas Complejos Nanoestructurados (Promep-Sep).

# Síntesis de nano-hidroxiapatita sobre biomateriales de uso ortopédico

Mónica Isabel Soto Tapiz<sup>1,\*</sup>, Mónica Carrillo Beltrán<sup>1</sup>, Benjamín Valdez Salas<sup>2</sup>, Roumen Zlatev<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Procesos Biotecnológicos y Biopelículas, Instituto de Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California-Campus Mexicali. <sup>2</sup>Laboratorio de Corrosión y Materiales, Instituto de Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California-Campus Mexicali.

<sup>3</sup>Laboratorio de Electroquímica Aplicada, Instituto de Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California-Campus Mexicali.

**Palabras clave**: Hidroxiapatita, Síntesis, Precipitación, Anodización, Nanotubos, Biocompatibilidad.

El objetivo de los implantes ortopédicos es restaurar la integridad estructural y la funcionalidad de tejidos fuertemente dañados, minimizar las complicaciones debidas a estructura fallida del implante, aflojamiento, etc.; así como mejorar la calidad de vida del paciente. Los implantes metálicos recubiertos con *Hidroxiapatita* (HA) combinan las ventajas de la bioactividad de la hidroxiapatita con las excelentes propiedades mecánicas de los substratos metálicos, los cuales se hacen más atractivos para aplicaciones médicas.

La hidroxiapatita (Ca<sub>10</sub> (PO<sub>4</sub>) (OH)<sub>2</sub>) ha sido ampliamente usada como un sustituto de hueso debido a su biocompatibilidad, ya que sus componentes minerales son similares a los del hueso y dientes del cuerpo humano. Se han desarrollado varias rutas para sintetizar HA usando métodos de hidrólisis, hidrotermales o de precipitación, caracterizándose este último por su simplicidad, bajo costo y aplicación a nivel industrial. Los recubrimientos de HA sirven también como capa protectora de los substratos metálicos en contra de la corrosión biológica. Sin embargo, la HA pura presenta problemas de estabilidad a corto plazo, tal bioresorción resulta en implantes fallidos e implantes flojos [1].

A la fecha, los métodos más comunes para obtener la HA por vía sintética son: hidrólisis, reacciones en estado sólido, reacciones hidrotermales, proceso sol-gel y precipitación. Los métodos basados en la precipitación de la HA consisten básicamente en mezclar fuentes de iones calcio y fosfato en un medio acuoso conveniente. La fuente de calcio puede suministrarse en forma de soluciones acuosas de CaCl<sub>2</sub>, Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CaCO<sub>3</sub> o Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub> o a partir de CaCO<sub>3</sub> o CaSO<sub>4</sub>\*2H<sub>2</sub>O sólido. Como fuentes de fosfatos pueden emplearse

<sup>\*</sup>moni tita@hotmail.com (estudiante de doctorado del Programa MYDCI).

soluciones acuosas de (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub>, NH<sub>4</sub>H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>, K<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub>, KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>, Na<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> o NaH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> [2].

El presente trabajo muestra los resultados obtenidos para la síntesis de nano-hidroxiapatita (nano-HA) por la vía de precipitación, utilizando una solución fisiológica sintética como fuente de calcio y fosforo. La nano-HA fue depositada sobre nanotubos de TiO<sub>2</sub> previamente obtenidos por anodizado de placas de titanio. La caracterización de los nanotubos y de la nano-HA se realizó mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FT-IR), microscopia de fuerza atómica (AFM), microscopia de barrido electrónico (SEM), así como cuantificación de las especies iónicas remanentes en la solución fisiológica. La biocompatibilidad de este cerámico, en combinación con factores de crecimiento plaquetario, será evaluada mediante el monitoreo de líneas celulares óseas.

**Agradecimientos**. Dra. Mónica Carrillo Beltrán (directora de tesis), Dr. Benjamín Valdez Salas (co-autor) y Dr. Roumen Zlatev (co-autor), Instituto de Ingeniería-UABC.

#### Referencias.

- [1] Wang Y., Zhang S., Zeng X., Ma<sup>c</sup> L.L., Weng W., Yan W. and Qian M., Acta Biomaterialia. **3**, 191-197 (2007).
- [2] Martins S.M, García C.R., Silas D., Giulietti M. y Rodríguez R.C., Instituto de Pesquisas Tecnologicas, Divisao de Quimica, Predio **36**, 1-8 (2008).

### Síntesis y caracterización de un nanocompuesto ácido orgánico/Montmorilonita. Su aplicación como catalizador heterogéneo.

M. Vargas-Rodríguez<sup>1,\*</sup>, R. Miranda<sup>1</sup>, J.A. Chávez<sup>2</sup>, M. Salmón<sup>3</sup> <sup>1</sup> Depto de Ciencias Ouímicas, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán-UNAM. Campo No. 1, Santa María Las Torres. Cuautitlán Izcalli. C.P. 54740. Estado de México. México. <sup>2</sup> Instituto de Ouímica, UNAM. Circuito Exterior. Ciudad Universitaria. Coyoacán 04510. México D.F. México.

<sup>3</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM. Circuito Exterior. Ciudad Universitaria. Coyoacán 04510. México D.F. México.

\*e-mail: vm\_vargas@vahoo.com.mx

Palabras clave: Nanociencia, Nanocompuestos montmoriloníticos, Catalizadores heterogéneos, Catalizadores ecoamigables.

Con el objetivo de reducir la cantidad de residuos generados en los procesos industriales, la toxicidad de los mismos a la salud y al medio ambiente, las investigaciones actuales convergen hacia el diseño y aplicación de nuevos catalizadores y sistemas catalíticos con base en los principios de la química verde. [1,2] En este trabajo se presenta la síntesis de un catalizador ecoamigable, un nanocompuesto de ácido (1R)-(-)-(10)alcanforsulfónico/montmorilonita (M-CSA), la caracterización del mismo por diversas técnicas analíticas y algunas pruebas de evaluación catalítica.

En este trabajo, se utilizó una arcilla montmorilonita natural (M-nat) de la región de Durango, previamente purificada y caracterizada [3]. La preparación del nanocompuesto se realizó con agua desionada, a partir de una suspensión de arcilla y una disolución del ácido.

Mediante microscopias electrónicas de barrido y de transmisión (MEB y MET) se analizó la morfología del compuesto. Por MEB se observan cúmulos cuyas dimensiones son de varias micras (Figura 1), sin embargo al ser estudiados por MET es posible determinar el tamaño nanométrico de las partículas en un intervalo de 10 a 50 nm (Figura 2). El análisis de composición química del nanocompuesto sintetizado presentó SO<sub>3</sub> (1.24 %), indicativo de la presencia del ácido (R)-alcanforsulfónico (CSA) en la montmorilonita. En el patrón de difracción de rayos X, Figura 3, se observaron todas las reflexiones características de la montmorilonita. Un incremento en la reflexión d001, de 1.231 a 1.43 nm, indicó que el CSA se encuentra en los sitios de intercambio [4].

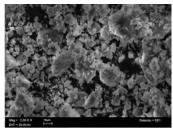


Figura 1. Micrografía obtenida por microscopia electrónica de barrido (MEB) de M-CSA

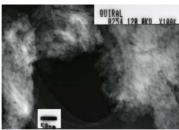


Figura 2. Micrografía obtenida por microscopia electrónica de transmisión (MET) de M-CSA

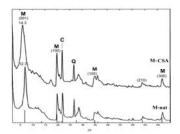


Figura 3. Patrón de difracción de rayos X (DRX) de M-CSA

Por resonancia magnética nuclear de giro de ángulo mágico (RMN-GAM), para los núcleos de <sup>29</sup>Si y de <sup>27</sup>Al, fue posible observar el ambiente tetraédrico del silicio y la abundancia relativas entre aluminio octaédrico y tetraédrico (que se encuentra sustituyendo a los átomos de silicio en la capa tetraédrica) [5].

La espectrofotometría de absorción infrarroja, presentó las señales características de los grupos hidroxilos de silicato aniónico y los cationes octaédricos de la estructura de la montmorillonita [6]. Mediante resonancia paramagnética electrónica (RPE) se estableció la presencia de núcleos paramagnéticos Mn<sup>2+</sup> y Fe<sup>3+</sup> [7]. El área superficial (BET) fue de 58 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup> y el volumen de poro (BJH) de 0.1323 cm<sup>3</sup> g<sup>-1</sup>.

La presencia del ácido alcanforsulfónico en el nanocompuesto, generó una acidez interlaminar tipo Brönsted-Lowry, esta acidez promovió la apertura del anillo de oxirano en condiciones suaves (temperatura y presión ambientes). La reacción del óxido de estireno en presencia de MeOH, promovida por el nanocompuesto, generó como producto mayoritario al 2-metoxi-2-feniletanol. La apertura del anillo de oxirano se realizó en condiciones más suaves y en tiempos más cortos, comparadas con otras arcillas modificadas. El catalizador se reutilizó seis veces. Esto protocolo beneficia a la química verde al utilizar un catalizador ecoamigable, disminuir el consumo de energía, además de recuperar y reutilizar al catalizador.

#### Agradecimientos.

Se agradece la asistencia técnica del Dr. F. J. Pérez-Flores, de la M.C. Virginia Gómez-Vidales y del Q. Jaime Pérez-Huerta. Asimismo, agradecemos el apoyo financiero del proyecto PAPIIT IN104808, otorgado por la DGAPA-UNAM.

#### **Referencias:**

- [1] P.T., Anastas. & Warner, J. C. *Green Chemistry: Theory and the practice*, Oxford University Press, Nueva York, (1998). p. 30.
- [2] P. T. Anastas, Mary M. Kirchhoff b, Tracy C. Williamson. *Applied Catalysis A: General*, **221**, 3 (2001).
- [3] Y. M. Vargas-Rodríguez, V. Gómez-Vidales, E. Vázquez-Labastida, A. García-Bórquez, G. Aguilar-Sahagún, H. Murrieta-Sánchez y M. Salmón. *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, **25**,135 (2008).
- [4] G.W. Brindley, G. Brown: *Crystal Structures of Clay Minerals and Their X-Ray Identification* (London Mineralogical Society, Londres, 1980).
- [5] C. Weiss, Jr., S. Altane, and R. Kirkpatrick, *American Mineralogist*, **72**, 935 (1987).
- [6] J. Madejova and P. Komadel, Clays and Clay Minerals, 49, 410 (2001).
- [7] P. L. Hall, Clay Minerals, 15, 321 (1980).

## Estudio de sistemas bimetálicos Cu/Zn-Mordenitas con propiedades catalíticas para la descomposición de NO<sub>x</sub>.

Viridiana Evangelista H.<sup>1,\*</sup>, Vitalii Petranovskii<sup>2,\*</sup>, Inocente Rodríguez Iznaga<sup>3</sup>, Andrey Simakov<sup>2</sup>, Felipe Castillón Barraza<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Posgrado en Física de Materiales, CICESE, Ensenada, B.C., México.

<sup>2</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología-UNAM, Ensenada, BC, México

<sup>3</sup>Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Universidad de La Habana, Cuba

\* Autores a contactar; e-mail: vevangel@cnyn.unam.mx; vitalii@cnyn.unam.mx

**Palabras clave**: intercambio iónico, mordenita, sistemas bimetálicos, catálisis, reducción de NO<sub>x</sub>

Para mejorar las cualidades y actividad de los catalizadores basados en zeolitas intercambiadas con cobre se ha propuesto la introducción de otros metales que actúan como promotores. En este sentido una de las reacciones de mayor interés es la reducción de  $NO_x$  en zeolitas modificadas con cobre, donde después de la introducción de un promotor, se observaron efectos sinergéticos en los sistemas binarios surgidos [1].

En este trabajo se presenta la preparación y estudio de sistemas bimetálicos de Cu/Zn-Mordenita con propiedades catalíticas para la descomposición de NOx, aplicando para su preparación procesos de intercambio iónico de cationes de estos metales en disolución acuosa. Se particularizó en el estudio del intercambio iónico de Cu<sup>2+</sup> y Zn<sup>2+</sup>, el proceso de reducción del Cu<sup>2+</sup> en presencia de cinc y en la actividad catalítica de estos sistemas. Se determinó como influían el orden de intercambio de estos cationes y la relación de volúmenes de sus disoluciones intercambiadoras en estos procesos de intercambio y en la actividad catalítica. Los resultados mostraron que las mordenitas tienen mayor preferencia por los cationes Cu<sup>2+</sup> que Zn<sup>2+</sup>. El orden de intercambio de los cationes determina la cantidad de cada tipo de cationes finales en los sistemas. Un aumento del volumen de la disolución intercambiadora de un tipo de catión favorece su intercambio y su cantidad resultante en la mordenita.

La actividad catalítica de estos sistemas bimetálicos, determinada en la reducción de NO en presencia de propeno y CO, incrementa con el contenido de cobre y varía con el orden de intercambio de estos cationes. La mayor actividad catalítica de estos sistemas bimetálicos corresponde a aquellos en que el cinc fue incorporado primero que el cobre. El comportamiento de esta actividad catalítica sugiere que existen diferentes sitios activos para la catálisis, siendo asociada su mayor actividad, a menores temperaturas, a la presencia de cúmulos del cobre.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen a E. Flores, I. Gradilla, E. Aparicio, M. Vega, T. Kretzchmar, T. Zepeda, S. Gómez, A. Hernández y M. A. Estrada, por su colaboración para la realización de este trabajo. Este trabajo esta soportado por los proyectos UNAM- PAPIIT IN110608, IN110208-3 y CONACYT 50547-Q.

### Referencias

[1] Zhang M., Flytzani-Stephanopoulos, J. Catal. 164, 131 (1996).

# Nanometric analysis of the polysulfone membrane surface used for hemodialysis in the consecutive regime. The AFM study.

Acosta García Ma. Cristina<sup>a,\*</sup>, Avalos Pérez Angélica<sup>a</sup>, Ramírez Mario Alberto<sup>a</sup>, Franco Martha<sup>b</sup>, Pérez Gravas Héctor<sup>b</sup>, Cadena Méndez Miguel<sup>c</sup> and Batina Nikola<sup>a</sup>

<sup>a)</sup> Laboratorio de Nanotecnología e Ingeniería Molecular, Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. \*) Posgrado en Biología Experimental

b) Unidad de Hemodiálisis del Departamento de Nefrología, Instituto Nacional de Cardiología Dr. Ignacio Chávez, México, D.F.

**Keywords**: Hemodialysis, polysulfone, AFM

**Abstract.** Nowadays, the hemodialytic treatment of patients with either acute or chronic renal failure has been improved by promoting biocompatibility in the use of new materials for hemodialysis membranes [1]. Membrane surface morphology characteristics are important to predict and achieved biocompatibility in different hemodialytic therapies. The pore size characterization and distribution on the membrane surface is of special importance for qualitative and quantity evaluation of the cartridge quality. Particularly, low and high flux polysulfone membranes used in dialysis and ultra filtration have been widely studied in order to understand the geometry and surface chemistry of the pores at inner (nanometric) and outer (micrometric) membrane parts [2-4]. In this work, we studied the surface changes of polysulfone cartridge membranes during different number of reuse trials. Cartridges with different number of consecutive use: single trail, after 10th and 23th times of use, were tested. The morphology of the hollow fiber surfaces was studied by means of the atomic force microscopy (AFM) imaging and the surface roughness analysis. The roughness of both inner and outer part of membrane surfaces increases with numbers of reuse trails. Thus, small and medium size pores were wiped out when the number of uses changed from zero to 23 on the outer surface. The pore density decreases. The inner part of membrane shows some nanometric size deformation in forms of new openings and raptures. Results of AFM analysis show significant differences in the morphology of the polysulfone membrane at the nanometric level, during the consecutive use of membranes, not previously revealed. This could be from significant importance in the process of evaluation of quality and way of use of membranes for hemodialysis.

**Acknowledgements:** This study was supported by CBI, UAM-I: "Técnica nanotecnológica y metabólica para valorar la calidad de los tratamientos médicos hemodialíticos", SEP-

c) Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación en Instrumentación e Imagenología Médica, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D.F. mcag6@yahoo.com, bani@xanum.uam.mx

CONACYT Project (CB-2006-1-61242): "Nanotecnología para medicina y biología: estudio de caracterización de células por AFM y STM" and UAM multidisciplinary investigation Project 13/2007: "Análisis nanométrico de proteínas de la membrana plasmática de células de cáncer, caracterización del receptor erbB2". Acknowledge to CONACYT for the scholarship.

#### **References:**

- [1] Humes H. D, Fissell W. H and Tiranathanagul. Kidney International, 69, 1115-1119 (2006).
- [2] Masayo Hayama, Fukashi Corrí and Kiyotaka Sakai. J. Membrane Science 197 (1-2), 243-249 (2002).
- [3] Nicholas A. Hoenich, Kostas P. Katopodis. Biomaterials 23, 3853-3858 (2002).
- [4] Shih-Hsiung Chen, Rey-May Liou, Yen-Yi Lin, Cheng-Lee Lai and Juin-Yih Lai. European Polymer Journal 45, 1293–1301 (2009).

# Simulación Monte Carlo de Mg<sup>2+</sup>, Na<sup>+</sup> y agua en una estructura de nano-poros, entre superficies (001) de montmorillonita

Miranda Pascual M. G.  $^{1y3*}$ , Chávez García M. L.  $^{1*}$ , De Pablo Galán L.  $^{2*}$ , Monsalvo Vázquez R.  $^{3***}$ 

<sup>1</sup>Facultad de Química, UNAM, Cd. Universitaria 04510, D. F. México, <sup>2</sup> Instituto de Geología, UNAM, Cd. Universitaria 04510, D. F. México, <sup>3</sup>UPIICSA, IPN, Av. Té, No. 950, Col. Granjas México, 08400, D. F. México

\* gpe mirandap@yahoo.com.mx , \*\* ramonza2000@yahoo.com.mx

Palabras clave: arcilla, montmorillonita, Monte Carlo

#### Resumen

La estructura cristalina de la montmorillonita es la responsable de las propiedades de expansión y de la absorción de cationes, estas fueron estudiadas usando simulación molecular Monte Carlo<sup>1</sup> para cationes de Na<sup>+</sup> y Mg<sup>2+</sup> con montmorillonita <sup>2,3</sup>. Las simulaciones se realizan en una celda de simulación de 21.12 y 18.28 Å (para x e y), con el eje z de dimensión variable, que depende del contenido de agua (48, 64, y 96 moléculas absorbidas) y de diferentes presiones (225,300 y 340Bar). Se tienen presente sitio de sustitución de Si/Al en la capa tetraédrica y de Mg/Al en la octaédrica, dando un total de carga de 0.75 la cual es balanceada por 6 iones Na<sup>+</sup> ó 3 iones Mg<sup>2+</sup> en el espacio interlaminar<sup>4</sup>.

Al realizarse la simulación, las moléculas de agua se coordinan con los cationes Mg<sup>2+</sup> y Na<sup>+</sup>, a la mitad del plano con los hidrógenos de las moléculas de agua orientados a la superficie de oxígenos de la arcilla. La arcilla con iones Mg<sup>2+</sup>, es homogénea, presencia de espaciados a dos capas de agua, con una esfera de coordinación cerrada<sup>5,6</sup>, para complejos de esfera externa y con número de coordinación de agua de 4 a 8, el cual es función de la presión y la cantidad de agua presente y (Tabla 1 y Figura 1).

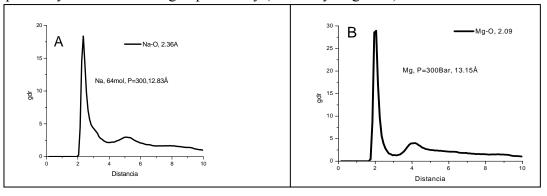


Figura 1. Distancia de separación M-O<sub>agua</sub>, con cationes M= sodio (A) ó magnesio (B), para 300 Bar, con 64 moléculas de agua.

Para condiciones similares, usando Na<sup>+</sup>-arcila, resultan hidrataciones a una capa de agua para cantidades pequeñas de agua y presiones altas; aumentos en la cantidad de agua ó disminución de la presión, presentan dos capas de agua en el espacio interlaminar y un número de coordinación de 5-8. Estas diferencia, se atribuyen a la diferente capacidad de hidratación de los cationes estudiados en este trabajo, mayor para el magnesio que para el sodio, con esferas de coordinación cerradas para Mg<sup>2+</sup> y presencia de una segunda esfera de coordinación (ver Figura 1).

**Tabla 1**. Resultados de la simulación para el sistema arcilla-Na, -Mg

Sistema	Presión (Bar)	Número de átomos		Espaciado	Numero de	Distancia		Número de coordinación	
						Primera esfera de coordinación			
		Na	Mg	(Å)	capas de H <sub>2</sub> O	Mg-O	Na-O	Na	Mg
	•		CON	48 MOLECU	JLAS				ı
Na	340	6		12.03	1		2.39	4.2	
Na	300	6		12.3	1		2.39	5.86	
Na	225	6		13.05	2		2.39	6.3	
Mg	340		3	12.3	2	2.1			5.8
Mg	300		3	12.6	2	2.1			6.3
Mg	225		3	13.2	2	2			8.3
	1		CON	64 MOLEC	ULAS		1		
Na	340	6		12.50	2		2.35	6.06	
Na	300	6		12.83	2		2.36	6.15	
Na	225	6		13.4	2		2.36	6.7	
Mg	340		3	12.89	2	2.09			6.56
Mg	300		3	13.15	2	2.09			6.9
Mg	225		3	13.6	2	2.09			7.05
			CON	OC MOLECI	II A C				
Na	340	6	CON	96 MOLECU 13.70	2 2		2.34	7.2	
Na	300	6		14.0	2		2.44	7.7	
Na	225	6		14.35	2		2.46	7.8	
Mg	340		3	14.0	2	1.95			7.0
Mg	300		3	14.4	2	2.05			7.1
Mg	225		3	14.7	2	2.05			8.02

Agradecimientos al IMP, Instituto de Geología UNAM, UPIICSA IPN.

#### Referencias

1. Matsuoka O., Clementi E. Y Yoshimine. (1976). CI study of the water dimer potential surface. *Journal Chemical Physics*. 64.1351-1361.

- 2. Bounds, D.G. (1985). A molecular dynamics study of the structure of water around the ions Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup> and Cl<sup>-</sup>. *Molecular Physics*.54. 1335-1355.
- 3. Brown G. and Brindley G.W. X ray diffraction procedures for clay mineral identification in crystal structures of clay minerals and their x-ray identification, 1980.
- 4. Skipper, N.T. Chang F.C, y Sposito, G. (1995). Monte Carlo simulation of interlayer molecular structure in swelling clay minerals. 1. Metodology. *Clays and Clay Minerals*. 43. 285-293.
- 5. Chávez-Paéz, M. de Pablo, L., de Pablo, J.J. (2001). Monte Carlo simulations of Camontmorillonites hydrates. *Journal of Chemical Physics*. 114. 10948
- 6. De Pablo, Chavez M.L. Sum A.K. and De Pablo J.J. Monte Carlo Molecular simulation of Na-montmorillonite at reservoir conditions. Journal of Chemical Physics. Vol. 120, No.2, 939-946, 2004

## Copper-silver bimetallic system on natural clinoptilolite: thermal reduction of exchanged Cu<sup>2+</sup> and Ag<sup>+</sup>

Inocente Rodríguez Iznaga<sup>1</sup>, Felipe Castillón Barraza<sup>2</sup>, Beatriz Concepción Rosabal<sup>1</sup>, Vitalii Petranovskii<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Ciencias y Tecnología de Materiales (IMRE) — Universidad de La Habana. Zapata y G, s/n La Habana 10400. Cuba

**Keyword**: Nanoparticles, Copper, Silver, Zeolite, Clinoptilolite,

Thermal reduction in hydrogen flow of Cu<sup>2+</sup> and Ag<sup>+</sup> mixed bimetallic system, exchanged in natural clinoptilolite from Tasajeras deposit, Cuba, was studied. Prepared materials were studied by XRD and UV-Vis spectroscopy. The special attention was paid to the analysis of mutual influence of both metals on the joint reduction [1], and the difference of the resulting nanoparticles [2,3].

The characteristic temperature of the reduction process of Cu<sup>2+</sup> and Ag<sup>+</sup> cations is sensitive to the presence of second cation, showing significant inter-influence between both cations during this process. The Cu<sup>2+</sup> reduction is significantly favored by the presence of Ag<sup>+</sup>, which can be related with both steric hindrance and/or interactions between different reduced species of copper and silver, such as positively charged silver clusters (Ag<sub>m</sub><sup>8+</sup>) that provoke rupture in the equilibrium of Cu<sup>2+</sup> with framework and weaken the Cu<sup>2+</sup>-framework interaction, facilitating the Cu<sup>2+</sup> reduction even at low temperature (25 and 50°C). The aggregation of the reduced atomic species both for copper and silver is limited in this bimetallic system. The reduction of Cu<sup>2+</sup> and Ag<sup>+</sup> in a bimetallic-cationic system exchanged in the zeolite matrix could constitute an alternative mode to control the size of the resultant reduced nanoparticles. Also, the copper reduction at low temperatures is favored in bimetallic system, which could lead to the diversity in obtained reduced copper species.

**Acknowledgements:** Thanks are given to E. Aparicio, E. Flores, M. Vega, T. Kreztchmar and

I. Gradilla for the precious technical support. This research was supported by the grants UNAM-PAPIIT IN110608, IN110208-3 and CONACYT 50547-Q.

#### References

[1] S. Fiddy, V. Petranovskii, S. Ogden and I. Rodríguez-Iznaga, X-Ray Absorption Fine Structure- XAFS 13: 13<sup>th</sup> International Conference, AIP Conf. Proc. Vol. 882 (2007) 631.

[2] B. Concepción-Rosabal, G. Rodríguez-Fuentes, N. Bogdanchikova, P. Bosch, M. Avalos, V.H. Lara. Microporous Mesoporous Mater. **86**, 249 (2005).

[3] I. Rodríguez-Iznaga, V. Petranovskii, G. Rodríguez-Fuentes, C. Mendoza, A. Benítez-Aguilar. J. Colloid Interface Sci. **316**, 877 (2007).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología (CNyN) — Universidad Nacional Autónoma de México. Ensenada, B.C. —México

<sup>\*</sup> Autor a contactar; e-mail: vitalii@cnyn.unam.mx

## Películas Delgadas de Óxidos Metálicos como Sustratos en el Crecimiento de Nanotubos de Carbono

A. M. Valenzuela-Muñiz<sup>1</sup>, Y. Verde-Gómez<sup>2</sup>, G. Alonso-Núñez<sup>3</sup>, M. Miki-Yoshida<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados S. C., Miguel de Cervantes 120, Chihuahua,

Chih., 31109, México.

<sup>2</sup>Instituto Tecnológico de Cancún, Kabah Km 3, Cancún, Quintana Roo, 77500, México. <sup>3</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Ensenada, Baja California, 22860, México

\* M. Miki-Yoshida; mario.miki@cimav.edu.mx, Tel. +52 (614) 439 1114

**Palabras clave**: Nanotubos de carbono, Niqueloceno, Películas delgadas, Aspersión pirolítica

Diversos autores [1,2] han reportado el empleo de ferroceno para la síntesis de NTC de pared múltiple de alta calidad. Sin embargo los agentes catalíticos a partir de fierro dejan impurezas como producto de las reacciones secundarias. Estas partículas pueden generar interferencias en algunas aplicaciones, sobre todo en catálisis. Por su parte el niqueloceno ha demostrado ser un buen catalizador en el crecimiento de NTC mediante aspersión pirolítica [3,4], pero este agente catalítico presenta un bajo rendimiento al crecer los NTC directamente sobre sustratos de vidrio [5]. En algunos estudios [6] ha sido demostrado que el empleo de un recubrimiento puede evitar la interacción del catalizador con el sustrato y por lo tanto facilitar el crecimiento de los NTC. En este trabajo se emplea la técnica de aspersión pirolítica para el crecimiento de películas de óxidos metálicos así como de los NTC por métodos similares a los reportados previamente [7, 1]. Para la síntesis de los NTC, se utilizaron tubos Vycor de 9 mm de diámetro recubiertos internamente con películas delgadas de óxidos de titanio y níquel como sustratos y niqueloceno como agente catalítico. De igual forma y a manera de comparación se llevaron a cabo depósitos sobre tubos de cuarzo y Vycor sin recubrimiento. La superficie de los materiales sintetizados fue analizada mediante microscopia electrónica de barrido. Las imágenes obtenidas hacen evidente la presencia de NTC sobre los diferentes sustratos empleados, mostrando también la formación de aglomerados de partículas metálicas y carbono amorfo. La película de óxido de titanio presenta una mejor disposición para el crecimiento de los NTC. Los diámetros de los NTC obtenidos se encuentran alrededor de los 80 nanómetros sin embargo no se logró un crecimiento alineado.

#### Referencias

- [1] Aguilar Elguézabal A., Antunez W., Alonso G., Paraguay F., Espinosa F., Miki-Yoshida M., Diam Relat Mater 15, 1329 (2006).
- [2] Qingfeng Liu, Zhi-Gang Chen, Bilu Liu, Wencai Ren, Feng Li Hongtao Cong, Hui-Ming Cheng, C arbon 46, 1892 (2008).
- [3] Rahul Sen, A. Govindaraj, C.N.R. Rao, Chemical Physics Letters, 267 (1997).

- [4] S.R.C. Vivekchand, L.M. Cele, F.L. Deepak, A.R. Raju, A. Govindaraj, Chemical Physics Letters, 386 (2004).
- [5] P. Mahanandia, P.N. Vishwakarma, K.K. Nanda, V. Prasada, K. Barai, A.K. Mondal, S. Sarangi, G.K. Dey, S.V. Subramanyam, Solid State Communications, 145 (2008).
- [6] Michael J. Bronikowski, Harish M. Manohara, and Brian D. Hunt, J. Vac. Sci. Technol. A Vol. 24, No. 4 1318 (2006).
- [7] M. Miki-Yoshida, W. Antúnez-Flores, K. Gomez-Fierro, L. Villa-Pando, R. Silveyra-Morales, P. Sánchez-Santiago, R. Martínez-Sánchez, M. José-Yacamán. Surface & Coatings Technology 200, 4111–4116 (2006).

## Ensamble molecular de NTC con éter corona para el desarrollo de sensores químicos

J.P. Camarena<sup>1</sup>, J.H. Espinoza Gómez<sup>1</sup>, R. Somanathan<sup>2</sup>, G. Alonso<sup>3</sup>, H. Tiznado<sup>3</sup>, E. Vélez-López<sup>1</sup>, M. Avalos<sup>3</sup>, M.A. Martínez-López<sup>1</sup>, E. Rogel-Hernández<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Baja California.

<sup>2</sup>Centro de Graduados e Investigación del Instituto Tecnológico de Tijuana.

<sup>3</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM.

Eduardo Rogel Hernández. Correo electrónico: eduardorogel60@uabc.mx

Palabras clave: Nanotubos, funcionalización, oxidación

**Resumen:** En el siguiente trabajo se muestra el ensamble molecular de la funcionalización de NTC-COOH por reacción de amidación, para la adición de 4-aminobenzo-15-corona-5 con la finalidad del desarrollo de sensores químicos.

#### Introducción

Debido a la estructura que presentan y su comportamiento químico, los nanotubos de carbono (NTC) han cobrado gran importancia, sus aplicaciones comprenden áreas de la nanociencia y la nanotecnología por ejemplo, polímeros y bilogia<sup>1, 2, 3,4</sup>.

#### **Experimental**

En un matraz de 150 ml con rosca, se adiciono 50 ml de una mezcla de acido sulfúrico y nítrico concentrados (1:3)<sup>5</sup> y 0.05 g de NTC, posteriormente se coloco en ultrasonido por 8 h. Una vez cumplido el tiempo de reacción, ésta se diluyo con agua desionizada y se filtró por medio de una membrana de PTEF de 0.45 μm de tamaño de poro y se realizaron lavados con agua desionizada. El producto obtenido se secó a 60 °C y a presión reducida por 24 h. Enseguida, en un matraz bola de 50 ml, se adicionó 15 ml de dimetilformamida (DMF) anhidra y 0.01 g de NTC oxidado, seguido de 1.507 g de dimetilaminopiridina (DMAP) y 0.02546 g de diciclohexilcarbodiimida (DCC), a temperatura ambiente y agitación constante, transcurrido 10 min, se le adicionó 0.035 g de 4-aminobenzo-15-corona-5 y se deja reaccionar durante 24 h. Finalmente el producto se filtró por medio de membranas de PTFE de 0.45 μm y se lavó con DMF. El producto se secó a presión reducida por 24 h.

#### RESULTADOS.

Se realizaron análisis de FT-IR y XPS. Los resultados mostraron lo siguiente: para el NTC-COOH, el FT-IR muestra dos señales importantes: una a 1735 cm<sup>-1</sup> que se asigna al carbonilo del ácido y una banda ancha a 3300 cm<sup>-1</sup> asignado al grupo hidroxilo. Para el ensamble molecular que se lleva a cabo mediante el NTC oxidado con el éter corona mediante la amidación (NTC-amida), el FT-IR mostró señales a 3351 cm<sup>-1</sup> que se le asigna al enlace N-H y otra a 1638 cm<sup>-1</sup> que se le asigna al enlace C=O. En la Figura 1 se muestra los espectros de XPS, 1a) la línea azul corresponde a NTC puro, y la línea roja muestra el

espectro del NTC-Amido (funcionalizado), en la figura 1b) se presenta la deconvolución del NTC puro, en el cual se observa el pico típico del enlace C-C a 284 eV, además de otros picos que se le atribuyen al CO o a impurezas, y en la figura 1c) se muestra la deconvolución del NTC-Amido, en el cual se denotan a 289.8 eV que se asigna al enlace C-N y a 286.5 eV que se asigna al C-O.

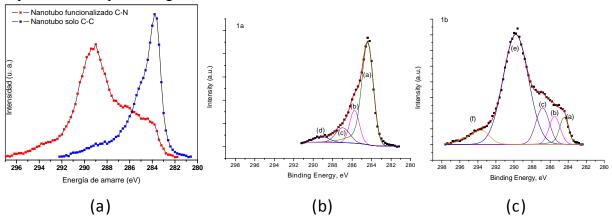


Figura 1. XPS (a) NTC puro y funcionalizado, (b) NTC puro, (c) NTC con grupo amido.

#### **CONCLUSIONES**

En base a los resultados obtenidos de FT-IR y XPS, en primer lugar, oxidamos a los NTC utilizando una mezcla de ácidos y por medio de ultrasonido y en segundo lugar, también se logró el ensamble molecular del NTC-COOH a NTC-amido con el 4-aminobenzo-15-corona-5 a temperatura ambiente y utilizando DCC y DMAP como aceleradores. Este compuesto, y otros con extensores alifáticos, se pretenden utilizar como sensores de metales alcalinos o sensores químicos.

**Agradecimientos.** Se agradece la participación de los técnicos: I. Gradilla, W. Antúnez, C. Ornelas, y al apoyo del proyecto PAPIIT IN102509-3

#### Referencias

- [1] Kannan Balasubramanian, marko Burghard; "Chemically Functionalized Carbon Nanotubes"; Small 1, 180 (2005).
- [2] Ya-Ping Sun, Kefu Fu, Yi Lin, Weijie Huang; "Functionalized Carbon Nanotubes: Properties and Aplications"; Acc. Chem. Res. 35, 1096 (2002).
- [3] Weijie Huang, Yi Lin, Shelby Taylor, Jay Gaillard, Apparao M. Rao, Ya-Ping Sun; "Sonication-Assisted Functionalization and Solubilization of Carbon Nanotubes"; Nano Lett., 2, 231 (2002).
- [4] Arben Merkoci, Martin Pumera, Xavier Llopis, Briza Pérez, Manuel del Valle, Salvador Alegret; "New Materials for Electrochemical Sensing VI: Carbon Nanotubes"; Trends in Analitytical Chemistry, 24, 826 (2005).
- [5] Lai Feng, Huanjun Li, Zujin Shi, Zhennan Gu; "Functionalization of carbon nanotubes with amphiphilic molecules and their Langmuir-Blodgett films"; Carbon 41, 2385 (2003).

## Fullerene thin films functionalized by 1,5-diaminonaphthalene: Preparation and properties

E. Martínez-Loran<sup>1,2</sup>, E. Alvarez-Zauco<sup>2,\*</sup>, V. A. Basiuk<sup>2</sup>, E. V. Basiuk<sup>3</sup> and M. Bizarro-Sordo<sup>4</sup>

**Keywords:** Fullerene C<sub>60</sub>, Thin Films, Functionalization, 1,5-Diaminonaphthalene, Surface and Electronic Properties

In this work we present a new method of functionalization of thin films of fullerene C<sub>60</sub> to modify their electronic properties. Physical vapor deposition was employed to grow thin films of  $C_{60}$  (99.5 % purity) of ca. 100-nm thickness at a pressure of  $2\times10^{-6}$  Torr. The films were exposed to 1.5-diaminonaphthalene vapors using gas-phase surface functionalization technique at a temperature of 190 °C and reaction time of 4 h. The functionalization conditions were optimized based on solubility tests of the films in toluene. After performing the treatment, the films were kept under vacuum and the reaction temperature in order to remove unreacted diaminonaphthalene. Raman spectroscopy analysis of the treated samples found a short-wave shift of the "pentagonal pinch mode" band at 1460 cm<sup>-1</sup>. This behavior is related to the cross-linking (or polymerization) of fullerene molecules and is consistent with the behavior of the fullerene characteristic modes at 525, 575 and 1180 cm<sup>-1</sup> in the Fourier-transform infrared spectra. A particular observation is a new signal corresponding to C-H bonds. Atomic force microscopy revealed clear changes in the film morphology, where the roughness of the functionalized films decreased as compared to pristine films: the typical C<sub>60</sub> clusters of about 50 nm ca. turned to be diffuse and blurry to such a degree that their boundaries became almost indistinguishable. Voltagecurrent curves measured showed a notable decrease in the surface film resistivity.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;

<sup>\*</sup> Author for correspondence; e-mail: <u>ezauco@ciencias.unam.mx</u>

## Noncovalent interaction of *meso*-tetraphenylporphine with $C_{60}$ fullerene as studied by several DFT methods

V. A. Basiuk\*, Y. Kolokoltsev and O. Amelines-Sarria

Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito

Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;

\* Author for correspondence; e-mail: basiuk@nucleares.unam.mx

**Keywords:** Porphyrins, *meso*-Tetraphenylporphine, C<sub>60</sub> Fullerene, Noncovalent Interactions, Density Functional Theory

We performed density functional theory (DFT) calculations of noncovalently bonded 1:1 complex of meso-tetraphenylporphine H<sub>2</sub>TPP with fullerene C<sub>60</sub>. The functionals used were PW91, PBE and BLYP of general gradient approximation (GGA), as well as PWC and VWN of local density approximation (LDA) as implemented in the DMol<sup>3</sup> module of Materials Studio package from Accelrys. The computed geometries were compared to the experimental X ray diffraction data obtained elsewhere for rhombohedral and monoclinic H<sub>2</sub>TPP+C<sub>60</sub> crystalline complexes. The covalent bond lengths and angles within H<sub>2</sub>TPP unit are best reproduced by BLYP functional, whereas PWC and VWN are least precise. On the other hand, PWC and VWN are the best functionals in reproducing the separations between and C<sub>60</sub> found from X-ray diffraction analysis: the LDA-calculated  $N(H_2TPP)^{--}C(C_{60})$  distances are of about 2.9-3.0 Å, whereas the corresponding experimental values are of ca. 3.0-3.1 Å. Next are PW91 and PBE functionals, giving N(H<sub>2</sub>TPP)···C(C<sub>60</sub>) distances of ca. 3.5-3.6 Å. BLYP produced the separations of around 4.0-4.1 Å, which are inconsistent with both X-ray data and the results produced other functionals. We also analyzed functional-dependent variations in formation energies, electrostatic potential, HOMO, LUMO and charge transfer. We concluded that of DFT functionals incorporated into DMol<sup>3</sup> module and tested in this study, PWC and VWN are the most adequate ones, and BLYP is the least recommended one for the studies of noncovalent interactions of porphyrins with carbon nanoclusters.

**Acknowledgements.** Financial support from the National Autonomous University of Mexico (grants DGAPA-IN101906 and -IN100107) and from the National Council of Science and Technology of Mexico (grants CONACYT-U48863-R and -56420) is greatly appreciated. We are also thankful to DGSCA UNAM for computer resources. Y. K. and O. A.-S. are indebted to CONACYT for Ph. D. fellowship.

### Self-assembly of *meso*-tetraphenylporphines on carbon nanomaterials

M. Bassiouk and V. A. Basiuk\*

Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico
\* Author for correspondence; e-mail: basiuk@nucleares.unam.mx

**Keywords:** Porphyrins, Scanning Probe Microscopy, Highly-Oriented Pyrolytic Graphite, Carbon Nanotubes

The self-assembly of well-defined porphyrin architectures is an area of increasing research interest, where molecular alignment and adjustable periodicity plays a central role. A classical support of choice is highly-oriented pyrolytic graphite (HOPG), with the possibility of direct imaging of the self-assemblies by scanning tunneling microscopy (STM). Other carbon forms of importance are fullerenes and carbon nanotubes (CNTs). Most studies employ commercially available and easy in preparation synthetic porphyrins (mainly derivatives of *meso*-tetraphenylporphine, H<sub>2</sub>TPP), with variable substituents and central metal atoms. This allows for tuning interactions between porphyrin molecules, their mutual orientation, and the array periodicity. The self-assembly employs noncovalent interactions (H-bonding,  $\pi$ - $\pi$  stacking, etc.) instead of covalent bonding to carbon material: this approach has such additional advantages as spontaneous generation of the most thermodynamically stable structure, the possibility of self-repair, as well as keeps the intrinsic electronic structure of carbon material essentially intact. Contrary to the selfassembled arrays on HOPG, porphyrin assemblies on CNT and fullerene surfaces lack a detailed characterization by STM, apparently due to a very high mobility of the species with respect to the support, probe and each other. Another issue which remains to be addressed is the mechanism of nanoassembly formation and growth. We employed MM+ molecular mechanical modeling and STM observations in order to explore the mechanisms of nanoassembly of H<sub>2</sub>TPP and its complex CoTPP on the surfaces of HOPG, HOPG-deposited single-walled carbon nanotubes (SWNTs) and fullerene C<sub>60</sub> films. According to the MM+ results, monolayer H<sub>2</sub>TPP adsorption on the above surfaces is more favorable thermodynamically than the formation of porphyrin stacks. The formation of parallel interacting chains of H<sub>2</sub>TPP on graphite is more preferable than the growth of long single chains; and the assembly into a long-period helix is favored versus the formation of a shortperiod helix on SWNT sidewall. STM observators of CoTPP complex deposited onto bare HOPG and onto HOPG-deposited SWNTs are generally consistent with theoretical results.

**Acknowledgements.** Financial support from the National Autonomous University of Mexico (grants DGAPA-IN101906 and -IN100107) and from the National Council of Science and Technology of Mexico (grants CONACYT-U48863-R and -56420) is greatly appreciated. M. B. is indebted to CONACYT for M. Sc. fellowship.

## AFM and STM studies of non covalent conjugates of human serum albumin deposited onto carbon nanotubes.

F. F. Contreras-Torres, A. Rodríguez-Galván, E. V. Basiuk, V. A. Basiuk Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito exterior S/N Ciudad Universitaria, A. P. 70-186, C. P. 04510 México D.F., Phone: +52(55)5622-8602 ext. 1150. Fax +52(55)5622-8651, e-mail: flavioc@nucleares.unam.mx

In this study, non covalent conjugates of human serum albumin (HSA) embedded onto single-walled carbon nanotubes (SWNTs) was investigated by Atomic Force Microscope (AFM) and Scanning Tunneling Microscope (STM), as surface characterization techniques; for comparison, HSA was also deposited onto high oriented pyrolytic graphite (HOPG). HSA was chosen since it shows a remarkable ability to bind a broad range of hydrophobic molecules and thus it can be inferred a capability to be bonded onto SWNTs. To the best of our knowledge, there is an evident lack of experimental data for this phenomenon and it was only addressed by a theoretical model (1) where a stronger interaction of sub-domains of HSA and models of SWNTs was predicted with a higher affinity. According to our experimental observations nanotubes can either partially or totally be embedded into a protein film by a nospecific binding, which is a pretty good characteristic that must allow the self-assembly of nanoblocks such as nanoparticles. Conditions of the experiments as well as respective comparison with theoretical results are detailed.

### Solvent-Free Functionalization of Multi-Walled Carbon Nanotubes with Aliphatic Amines

O. E. Ochoa-Olmos<sup>1</sup>, V. Meza-Laguna<sup>2</sup>, F. F. Contreras-Torres<sup>1</sup>, E. Alvarez-Zauco<sup>2</sup>, I. Puente-Lee<sup>3</sup>, E. V. Basiuk<sup>1,\*</sup>, and V. A. Basiuk<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, 04510 México D.F., Mexico;

<sup>2</sup> Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior C. U., 04510 México D.F., Mexico;

<sup>3</sup> Facultad de Química, UNAM, Circuito de la Investigación Científica, C. U., 04510 México D.F., Mexico

**Keywords**: Amines, Functionalization, Solvent-Free, 1,8-Diaminooctane, Octadecylamine, Polyethyleneglicol-diamine, Polyethylenimine

Abstract. The toxicity of carbon nanotubes (CNTs) can be dramatically reduced by means of chemical functionalization. Amine-functionalized CNTs are especially promising for biomedical applications, since their amine groups can participate in strong electrostatic interactions with biological components, and immobilize the latter securely onto the nanotube surface. The developing of non-contaminating functionalization schemes is crucial for facilitating the biological and biomedicinal applications of CNTs. In this study we employed two different solvent-free methods (one-step gas-phase and melting reactions) for chemical functionalization of pristine multi-walled CNTs (MWNTs) with different amines, namely 1,8-diaminooctane, octadecylamine, polyethyleneglicol-diamine of 2000-kDa molecular weight, and branched polyethylenimine of 25000-kDa molecular weight. The amine-functionalized MWNTs were characterized by infrared and Raman spectroscopy, scanning and transmission electron microscopy, atomic force microscopy, and thermal gravimetric analysis.

**Acknowledgements.** V. Meza-Laguna, F. F. Contreras-Torres and E. Alvarez-Zauco are grateful for the fellowship from the Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA), at the National Autonomous University of Mexico (UNAM). Financial support through grants DGAPA-IN103009 and IN100107, CONACYT-56420 and U48863-R is greatly appreciated.

#### References

[1] V. A. Basiuk, C. Salvador-Morales, E. V. Basiuk, R. Jacobs, M. Ward, B. Chu, R. B. Sim, and M. L. H. Green, J. Mater. Chem. **16**, 4420 (2006).

[2] C. Salvador-Morales, E. V. Basiuk, V. A. Basiuk, M. L. H. Green, and R. B. Sim, J. Nanosci. Nanotechnol. **8**, 2347 (2008).

<sup>\*</sup> Author for correspondence; e-mail: elenagd@servidor.unam.mx

## Optical and Photoelectrical Studies of Gold Nanoparticles-Decorated C60 Films.

N. L. Dmitruk1, O. Yu. Borkovskaya1, S. V. Mamykin1, D. O. Naumenko1, V. Meza-Laguna2, E. V. Basiuk (Golovataya-Dzhymbeeva)3\*.

<sup>1</sup>Institute for Physics of Semiconductors, National Academy of Sciences of Ukraine, 45 Nauki Prospect, Kyiv 03028, Ukraine

<sup>2</sup> Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, A. P. 70-186, C. P. 04510 México D.F. <sup>3\*</sup> Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito exterior S/N Ciudad Universitaria, A. P. 70-186, C. P. 04510 México D.F., Phone: +52(55)5622-8602 ext. 1150. Fax +52(55)5622-8651, e-mail: elenagd@servidor.unam.mx

**Keywords:** fullerene films, octane-1,8-dithiol, cross-linking, gold nanoparticles, barrier heterostructure, photocurrent spectra, extinction coefficient spectra.

Optical and photoelectrical studies were performed on octane-1,8-dithiol cross-linked C60 films, with supported gold nanoparticles  $(C_{60}\text{-DT-Au})^{1,2}$ . The comparative investigation of optical properties of pristine and cross-linked  $C_{60}$  films, decorated with gold nanoparticles, found the difference in the extinction coefficient spectra, which made influence on the photocurrent spectra of barrier heterostructure Au/ $C_{60}$ /Si. The analysis of dark I-V characteristics for Au/ $C_{60}$ /Si heterostructures showed that the model for them includes the barrier at the  $C_{60}$ /Si interface and internal barriers in  $C_{60}$  layer, caused by the trapping centers. The hopping mechanism of the current-transport in  $C_{60}$  layer was supplemented with Poole-Frenkel emission process on these centers, with the barrier height greater for the fullerene C60 film cross-linked with octane-1,8-dithiol.

#### Acknowledgements

Financial support from grants DGAPA IN103009 and CONACYT-56420 is greatly appreciated.

#### References

- [1]. V. Meza-Laguna, E. V. Basiuk (Golovataya-Dzhymbeeva), E. Alvarez-Zauco, T. Yu. Gromovoy, O. Amelines-Sarria, M. Bassiouk, I. Puente-Lee, and V. A. Basiuk, J. Nanoscience and Nanotechnology **8**(8), 3828 (2008).
- [2] N. L. Dmitruk, O.Yu. Borkovskaya, S.V. Mamykin, D.O. Naumenko, N.I. Berezovska, I.M. Dmitruk, V. Meza-Laguna, E. Alvarez-Zauco, and E.V. Basiuk, *J. Nanoscience and Nanotechnology* **8**(11), 5958 (2008).

### Synthesis and characterization of ZnO nanoparticles on multiwall carbon nanotubes: An application for photovoltaic devices

Martínez-Rodríguez M.<sup>1,\*</sup>, Soto Herrera G<sup>2</sup>, Martínez-Ruiz A.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias Universidad Autónoma de Baja California MyDCI-Nanotecnología <sup>2</sup>Centron de Nanociencias y Nanotecnología UNAM-Ensenada mago 14@hotmail.com alejandro@uabc.mx

Novel applications in nanotechnology rely on the design of composite nanoarchitectures. For this purpose, carbon nanotubes and nanoparticles are intensively investigated. In this work, we study the influence of functionalized multiwall carbon nanotubes on the synthesis of ZnO nanoparticles by means of organometallic solution routes<sup>[1]</sup>. This new synthesis methodology not only provides an effective path to attach nanoparticles noncovalently to multiwall carbon nanotubes but represents also a new way to control the size of nanoparticles on functionalized multiwall carbon nanotube surface.

Our materials was synthesized from zinc acetate <sup>[2]</sup> and functionalized multiwall carbon nanotubes. It performed SEM-EDS analysis in order to reveal the microstructure of the resulted materials. In addition, TEM, XRD, and cyclic voltammetry (CV) analysis were performed to recognize the crystal structure and electrical properties.

**Acknowledgments**: This work is partially supported through research grant from CONACyT.

**Keywords**: ZnO, Nanoparticles, Nanostructured, Carbon nanotube.

#### **References:**

- [1] K.S. Leschkies, R. Divakar, J.Basu, E. Enache-Pommer, J. E. Boercker, C. B. Carter, U. R. Kortshagen, D. J. Norris, and E. S. Aydil\*, NANO LETTERS Vol. 7, No. 6 pág. 1793-1798 (2007)
- [2] U. Pal, J. Garcia Serrano, P. Santiago, Gang Xiong, K.B. Ucer and R.T. Williams Optical Materials 29, 65–69(2006)

## Synthesis of titanium oxide nanoparticles supported in carbon nanotubes for the photoelectrodes manufacture.

Mosqueda De la O K.<sup>1</sup>, Contreras López O. E.<sup>2</sup>, Martínez Ruiz A.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Baja California, Km. 106 Carretera Tijuana Ensenada C.P. 1880

Ensenada, Baja California, México.

Maestría y Doctorado en Ciencias e Ingeniería: área Nanotecnología

<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM-Ensenada

dniz mosqueda@yahoo.com.mx alejandro@uabc.mx

Until now, the conversion of solar radiation in electricity has been realized whit photovoltaics devices; it is for that reason solar energy it's more important due to the evil been in which is our ecosystem and to the possible exhaustion of oil [1,2,3]. The photovoltaic process widely is known like generator using semiconductor materials such as SiO<sub>2</sub>, CdSe, TiO<sub>2</sub>, CdS, GaAs, ZnS, CuInSe<sub>2</sub>, etc. At the moment the investigation of nanocomposites has been the center of study to create new devices with highly promising different properties [3,4,5,6]. Moreover, the carbon nanotubes (CNTs) have demonstrated to be material apt to support different electronically active materials and the MWCNTs with metal oxides are expected to exhibit different properties, therefore the structural basis for good electronic transport is very important [7,8,9]. The electrochemical reactions are heterogeneous reactions, that is to say they carry out in the interface electrode/electrolyte. Thus the electroactive species, ions or molecules are oxidized or reduced (red-ox process) on the electrode surface, which acts as a source or electron acceptor. The importance of a red-ox reaction, is the fact that you can make the electron transfer takes place in a pair of electrodes immersed in an electrolytic medium and connected to an external controller circuit [10].

In this work the chemical preparation of  $TiO_2$  particles supported in multiwall carbon nanotubes was realized from titanium (IV) n-butoxide precursor and functionalized multiwall carbon nanotubes (MWCNTs) like support. The characterization was performed using SEM-EDS, XRD and TEM to determine the morphology and elemental composition and cyclic voltammetry (CV) for red-ox process.

Key Words. Titanium Oxide, Carbon Nanotubes, Photovoltaic, Photoelectrochemistry.

**Acknowledgments.** Financial support from conacyt, technical support from CNyN-UNAM and training from UABC.

#### References

- 1.- <a href="http://saecsaenergiasolar.com/renovables/energia\_solar/">http://saecsaenergiasolar.com/renovables/energia\_solar/</a>
- 2.- International Energy Agency (IEA) USA. Oil Market Report (2008). <a href="https://www.oilmarketreport.org">www.oilmarketreport.org</a>

- 3.- http://www.forosdeelectronica.com/tutoriales/historia.htm
- 4.- Reviews Chem. Mater. (2001), 13, 3843-3858
- 5.- Universitat Jaume I, España. (2002). www.elp.uji.es
- 6.- J. Am. Chem. Soc.(2008), 130, 4007-4015.
- 7.- Nano Lett., Vol. 2, No. 3, 2002, 195 200.
- 8.- Ind. Eng. Chem. Res. 2008, 47, 6598–6606.
- 9.- Nano Lett., Vol. 3, No. 4, 2003, 447 453.
- 10.- Juan Bisquert. Universitat Jaume I, España. (2002). www.elp.uji.es

## Funcionalización de nanopartículas de TiO<sub>2</sub>. Estudio experimental y teórico.

J. Bonilla-Cruz<sup>1\*</sup>, I. Nieto-López<sup>1</sup>, M. Sánchez-Vázquez<sup>1</sup>, E. Saldívar-Guerra<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. (CIMAV-Unidad Monterrey).

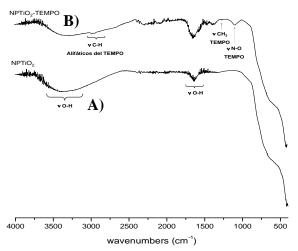
Alianza Norte 202 Autopista Mty.-Aeropuerto Km.10, PIIT, Apodaca, N. L., México C.P.

66600

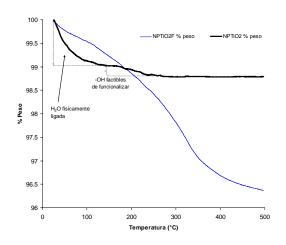
<sup>2</sup>Centro de Investigación en Química Aplicada (CIQA). \*e-mail: jose.bonilla@cimav.edu.mx

Palabras clave: Nanopartículas, nitróxido, DFT, TGA, funcionalización

Una nueva y robusta ruta para funcionalizar o modificar químicamente la superficie de nanopartículas, en particular nanopartículas de dióxido de titanio (NPTiO<sub>2</sub>) es presentada. El desarrollo de materiales híbridos (nanopartículas-polímero) ha sido y sigue siendo un campo de gran interés científico e industrial por sus aplicaciones potenciales en cosméticos, pinturas, adhesivos, textiles, aplicaciones biomédicas, óptica, electrónica, dispersión de partículas en matrices poliméricas, etc.[1,2]. Por su parte, las sales de halógeno-nitróxido (Br-TEMPO) no han sido empleadas con anterioridad para estos fines[3,4]. El mecanismo de funcionalización es propuesto en donde se sugiere la formación de enlaces peróxido. La evidencia de la funcionalización de las NPTiO<sub>2</sub> es confirmada por FT-IR y TGA. La cuantificación del contenido de grupos peróxido formados fue realizada mediante titulación en donde se obtuvieron moderadas eficiencias de funcionalización (~30%). Finalmente, la ruta sintética propuesta es soportada mediante estudios computacionales utilizando la teoría de los funcionales de la densidad (DFT, Density Functional Theory), que en combinación con el conjunto de bases 6-31G(d) y métodos semiempíricos como PM3 implementados en Gaussian 03, revelaron que el mecanismo de funcionalización y la formación de grupos peróxidos son procesos energéticamente favorables.



**Figura 2.** Espectro de FT-IR de: A) NPTiO<sub>2</sub> no modificadas y B) NPTiO<sub>2</sub> funcionalizadas con TEMPO empleando sales de oxoamonio (Br-TEMPO)



**Figura 3.** Análisis de TGA de NPTiO<sub>2</sub> sin modificar y NPTiO<sub>2</sub>-F funcionalizadas com grupos nitróxido

En resumen, el uso de la química de nitróxidos en particular el uso de sales de oxoamonio (halógeno-nitróxido) en la funcionalización de nanopartículas metálicas no ha sido reportado anteriormente. En este trabajo, por primera vez se muestran evidencias experimentales y teóricas de la modificación de la superficie de nanopartículas de dióxido de titanio (NPTiO2) con TEMPO empleando sales de Br-TEMPO. Los resultados sugieren que: 1) Las sales de oxoamonio son buenos candidatos en la funcionalización de los grupos -OH químicamente ligados a la superficie de nanopartículas metálicas. 2) El mecanismo sugerido de funcionalización en donde se propone la formación de grupos peróxido fue comprobado y soportado por cálculos semiempíricos y por DFT, en donde se estimó la energía de ruptura del enlace O-O (50.35 kcal/mol) y se comprobó las distancias de enlace entre el complejo Ti-O-TEMPO, 3) Los espectros de infrarrojo y análisis termogravimétricos experimentalmente sugieren que la funcionalización se llevó a cabo. 4) Finalmente, la eficiencia de funcionalización bajo condiciones suaves de reacción estimada fue de un 30%.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen al Proyecto de Ciencia Básica del CONACYT (84322) por el apoyo en la realización de esta investigación, así como al MC. Alberto Toxqui por realizar los análisis de TGA y a la Quím. Nayeli Pineda por el apoyo en titulación de grupos peróxido.

#### Referencias

- [1] A. Ditsch, S. Lindenmann, P. E. Laibinis, D. I. C. Wang, T. A. Hatton, Ind. Eng. Chem. Res. 44, 6824 (2005)
- [2] S. H. Sun, H. Zeng, D. B. Robinson, S. Raoux, P. M. Rice, S. X. Wang, G. X. Li, J. Am. Chem. Soc. 126, 273 (2004)
- [3] J. Bonilla-Cruz, T. E. Lara-Ceniceros, E. Saldívar-Guerra, E. Jiménez-Regalado, Macromol. Rapid Comunn. 28, 1397 (2007)
- [4]: J. Bonilla-Cruz, T. E. Lara-Ceniceros, E. Saldívar-Guerra Patente Mexicana MX/E/2007/084350 (CIQA 2007)

### From graphene to carbon nanotube

Uriel A. Luviano Valenzuela<sup>1</sup>, Wallace Herron Montaño<sup>2</sup>, Ulises Tamayo Pérez <sup>2</sup> and Alejandro Martínez-Ruiz<sup>2</sup>

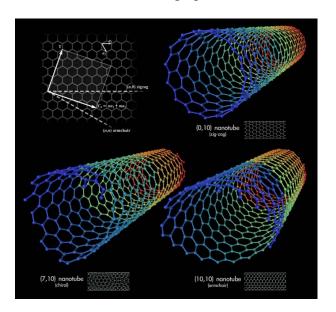
\*\*I Preparatoria Cetys Ensenada\*\*

<sup>2</sup> Facultad de Ciencias UABC, Maestría y Doctorado en Ciencias e Ingeniería: área
Nanotecnología

uri.luviano@gmail,com alejandro@uabc.mx

A carbon nanotube is a honeycomb lattice rolled into a cylinder. The diameter of a carbon nanotube is of nanometer size and the length of the nanotube can be more than  $1\mu m$ . One of the most significant physical properties of CNT's is their electronic structure which depends only on their geometry, and is unique to solid state physics. Specifically, the electronic structure of a single wall carbon nanotube is either metallic or semiconducting depending on its diameter and chirality, and does not requiring any doping  $^{1,2}$ .

The purpose of this work is to explain thought of the laminar models, the different structures for single wall carbon nanotube from graphene <sup>3</sup>.



#### References

- 1.- Saito R, G. Dresselhause and M/ S. Dresselhause. Physical properties of carbon nanotubes. Imperial College Press, 2005.
- 2.- Michael J. O'Conell. Carbon Nanotubes, Proprties and Applications. Taylor and Francis, 2006.
- 3.http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/5/53/Types of Carbon Nanotubes.png

## Calculation of the dielectric function of zigzag(6,0) boron nitride nanotubes with adsorption of molecular hydrogen

R. A. Vazquez-Nava<sup>1,\*</sup>, N. Arzate<sup>1</sup> and J. E. Mejía<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigaciones en Optica A. C., Loma del Bosque 115, Col. Lomas del Campestre, León, Guanajuato, México.

<sup>2</sup> Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara, México \*

\* Dr. Raúl Vázquez; e-mail: alfonso@cio.mx

Palabras clave: Nanociencia, Cálculos de Primeros Principios

We present ab initio calculations for the dielectric function of single wall zigzag (6,0) boron nitride nanotubes as a function of molecular hydrogen adsorption. The ab initio calculations are performed within Density Functional Theory. We consider different nanotube-structures adsorbed with different coverage of molecular hydrogen. We find optimized atomic coordinates for such structures and calculate binding energies for the molecule of hydrogen on the nanotube. We also present the energy loss function spectra of the considered structures.

**Agradecimientos.** This work has been partly supported by CONACYT, México, grants: SEP-2004-C01-48142 and SEP-2003-C02-42576, SEP-2005-C01-49678-F.

### Electroluminiscencia en silicio pororoso

F. Severiano-Carrillo<sup>1</sup>, G. G. Salgado<sup>2</sup>, A. Méndez-Blas<sup>1</sup>, J.M. Gracia y Jimenez<sup>1</sup>, E. Sánchez-Mora<sup>1</sup>

Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48, C.P. 72570, Puebla, Pue., México.

Instituto de Semiconductores, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, C.P. 72570, Puebla, Pue., México

En este trabajo se estudia la electroluminiscencia (EL) en muestras de silicio poroso (SP) con y sin tratamiento térmico, utilizando como cátodo una película de oxido de estaño dopado con flúor (SnO2:F), depositada mediante rocío pirolítico sobre el SP. Las características de las películas de silicio poroso (PSP) se determinaron mediante gravimetría, lo que nos permitió conocer su porosidad y espesor, y por fotoluminiscencia, para determinar su eficiencia. Estos datos permitieron seleccionar los mejores resultados para cada etapa del proceso de fabricación. El recubrimiento utilizado como cátodo (SnO<sub>2</sub>:F) se caracterizó por espectrofotometría mediante la cual se obtuvieron espectros de reflectancia, que nos permitió calcular la banda de energía prohibida, transmitancia, para estimar el espesor de las películas depositadas, y absorbancia, para conocer la transparencia de estos recubrimientos a la emisión obtenida, también se realizo la caracterización eléctrica mediante el método de las dos puntas. Una vez conocidas las características de las PSP y de los recubrimientos de SnO<sub>2</sub>:F se realizó la construcción de los dispositivos electrolumiscentes (DEL) y se estudió la respuesta de EL bajo diferentes condiciones de corriente aplicada. La EL se caracterizó mediante espectros obtenidos mediante un monocromador y una cámara CCD. La emisión obtenida tiene una componente en el visible que se puede apreciar a simple vista y otra en la parte IR del espectro electromagnético que es predominante. Gracias a estos espectros se pudo determinar que el espesor y la porosidad en las PSP juegan un papel determinante en la EL de los DEL. Por otro lado, se compararon DEL en los cuales a las PSP se les realizó un tratamiento térmico a 300 °C, esto permitió llegar a la conclusión de que este es equivalente al proceso de recubrimiento con SnO<sub>2</sub>:F a 600 °C. Además, se realizaron experimentos adicionales basados en películas de óxido de Silicio enriquecido (SRO) depositadas mediante depósito químico en fase vapor asistido con filamento caliente (HFCVD), que permiten explicar el posible origen de la EL obtenida.

### Termoluminiscencia de ZnO Obtenido por Tratamiento Térmico de ZnS Sintetizado Químicamente

J. L. Iriqui-Razcón<sup>1</sup>, C. Cruz-Vázquez<sup>1</sup>, R. Bernal<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales de la Universidad de Sonora, Apartado Postal 130, Hermosillo, Sonora 83000 México

<sup>2</sup> Departamento de Investigación en Física de la Universidad de Sonora, Apartado Postal 5-088, Hermosillo, Sonora 83190 México

\* jorgeiriqui@gimmunison.com

Palabras clave: dosimetría, termoluminiscencia, ZnO, radiación beta.

Nuestro grupo de trabajo propuso por primera vez la posibilidad de aplicar en dosimetría termoluminiscente ZnO obtenido por tratamiento térmico de ZnS sintetizado por un método químico, en base a los resultados obtenidos al caracterizar sus propiedades termoluminiscentes al ser expuesto a radiación beta. En este trabajo se reporta la caracterización termoluminiscente de ZnO obtenido a partir de la oxidación térmica de ZnS sintetizado usando un método químico modificado. Se estudió la termoluminiscencia (TL) de muestras sinterizadas en aire a 700, 850 y 950 °C. Al aumentar la temperatura de sinterizado, aumenta la sensibilidad y se modifica la estructura de las curvas de brillo. La TL de las muestras sinterizadas a 700 °C es mucho menor que la de las sinterizadas a 850 y 950 °C, en las que se observa emisión desde temperaturas menores a 100 °C hasta 400 °C, con máximos en 140 y 315 °C al utilizar una rapidez de calentamiento de 5 °C/s. Las muestras tratadas a 950 °C son las más sensibles, y exhiben una respuesta de TL lineal en el intervalo de dosis investigado (10 - 150 Gy). Las sinterizadas a 850 °C muestran una respuesta no lineal. El máximo a 315 °C se desplaza a temperaturas menores a medida que aumenta la dosis de irradiación, lo que caracteriza procesos termoluminiscentes de segundo orden. Por la respuesta lineal en el intervalo de dosis estudiado, que es de interés para aplicaciones médicas, así como la posición del máximo de emisión, sensibilidad y propiedades físicas y químicas del ZnO, concluimos que los materiales fabricados son promisorios para el desarrollo de dosímetros termoluminiscentes de alto desempeño.

#### Referencias

- [1] C. Cruz-Vázquez and R. Bernal, Optical Materials, 27, 1235 (2005).
- [2] C. Cruz-Vázquez and S.E. Burruel-Ibarra, Radiation Effects & Defects in Solids, **162**, 1 (2007).
- [3] C. Cruz-Vázquez and V.R. Orante-Barrón, Materials Letters, 61, 1097 (2007).

### Propiedades Termoluminiscentes de Nanofósforos de ZnO Sinterizados a Diferentes Temperaturas

H. A. Borbón-Nuñez<sup>1</sup>\*, C. Cruz-Vázquez<sup>1</sup>, F. Brown<sup>1</sup>, R. Bernal<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales de la Universidad de Sonora, Apdo. postal 130, Hermosillo, Sonora 83000 México.

<sup>2</sup>Departamento de Investigación en Física de la Universidad de Sonora, Apdo. postal 5-088, Hermosillo, Sonora 83190 México.

\* hugoborbon@gimmunison.com

Palabras clave: Nanofósforos, ZnO, Termoluminiscencia.

El ZnO es un material de gran interés por ser un semiconductor de banda de energía prohibida ancha, y que puede formar distintas estructuras nanométricas, lo que le otorga potencial para toda una gama de aplicaciones. Sin embargo, las propiedades termoluminiscentes de este material no han sido estudiadas sistemáticamente con fines de aplicaciones dosimétricas. Solo recientemente se ha reportado la obtención de ZnO a partir de un método químico, con propiedades atractivas para dosimetría termoluminiscente de dosis altas, debido a su buena respuesta termoluminiscente, así como su dureza a la radiación ionizante<sup>1, 2</sup>. Se ha observado que el método de síntesis, influyen de forma determinante sobre las propiedades termoluminiscentes del ZnO. En este trabajo se reporta la obtención de nanofósforos de ZnO, a partir de un método químico modificado, con propiedades que los hacen candidatos promisorios para utilizarse como detectores y dosímetros de radiación ionizante. Para la síntesis se utilizó una sal de Zn y tiourea en presencia de un medio alcalino. A partir del polvo precipitado obtenido, se fabricaron muestras en forma de pastilla, y fueron sometidas a tratamientos térmicos a 850, 900 o 950 °C por 24 h en atmósfera de aire. La respuesta termoluminiscente se estudió en el intervalo de dosis de 50 a 400 Gy de irradiación con partículas beta. La intensidad de las curvas de brillo se incrementa a medida que aumenta la dosis, sin observarse tendencia a la saturación, ni desplazamiento del máximo de emisión, lo que es característico de procesos con cinética de primer orden. La emisión termoluminiscente más intensa se observa entre los 200 y 350 °C, si se utiliza una razón de calentamiento de 5 °C / s. Este intervalo de emisión es adecuado para dosimetría termoluminiscente. La sensibilidad relativa de los nanofósforos se incrementa con la temperatura de sinterizado. La caracterización estructural y morfológica de las muestras se llevó a cabo por difracción de rayos X y microscopía electrónica de barrido, respectivamente. El análisis elemental fue obtenido por espectroscopía dispersiva de energía de rayos X.

#### Referencias

- [1] Cruz-Vazquez C., Bernal R., Burruel-Ibarra S.E., Grijalva-Monteverde H., Barboza-Flores M., Opt. Mat. 27. 1235-1239. (2005).
- [2] Cruz-Vazquez C., Burrel-Ibarra S.E., Grijalva-Monteverde H., Chernov V., Bernal R. Radiation Effects and Defects in Solids. **162**. 1-7. (2007).

## Propiedades ópticas obtenidas por reflectancia especular de películas de ZrO<sub>2</sub> crecidas por PLD

L.O. Prieto-López<sup>1,\*</sup>, W. De La Cruz<sup>1</sup>, J. Ferrer<sup>2</sup>, F. Yubero<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22860, México.

<sup>2</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (CSIC-Univ. Sevilla). Avda. Américo Vespucio 49. 41092 Sevilla (España).

\* Autor a contactar; e-mail: lizzy.prieto@gmail.com

Palabras clave: ZrO<sub>2</sub>, PLD, reflectancia especular, RBS

Se crecieron películas delgadas de ZrO<sub>2</sub> sobre sustratos de silicio (111) mediante la técnica de ablación láser. Para el crecimiento se utilizó un blanco de zirconio con pureza del 99.8%, una presión de oxígeno de 1 mTorr y 5 mTorr en la cámara de crecimiento y una temperatura de sustrato de 600 °C. La composición elemental se analizó mediante RBS, con partículas α de 3 MeV. La composición encontrada correspondió a la estequiometría del ZrO<sub>2</sub>. Las propiedades ópticas de las películas se obtuvieron por la técnica de reflectancia especular. Los resultados mostraron que el índice de refracción varía con el grosor de la muestra, teniendo valores en el intervalo de 2.26 a 2.14. Se encontró un coeficiente de extinción alrededor de 0.01. La calidad de los ajustes entre las medidas de reflectancia y los modelos utilizados se evaluó a partir del coeficiente de regresión, el cual registró valores de 0.999. Los grosores obtenidos a partir de las medidas de reflectancia mostraron una velocidad de crecimiento de 1 nm por cada 95 pulsos de láser.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen por el soporte técnico a J.A. Díaz, V. García y P. Casillas.

### Respuesta Óptica de una Estructura de Multicapas de Fibonacci con Velocidad de Fase Negativa

X. I. Saldaña<sup>1\*</sup>, G. H. Cocoletzi<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, México. <sup>2</sup>Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107 Carretera Tijuana-Ensenada, Código Postal 22860, Apartado Postal 2732 Ensenada, Baja California, México. <sup>3</sup>Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México.

\* xochitl@sirio.ifuap.buap.mx

**Palabras clave**: Multicapas de Fibonacci, velocidad de fase negativa, autosimilaridad, multifractalidad.

En 1968 V. Veselago [1] predijo nuevas propiedades para materiales caracterizados por una permitividad dieléctrica y una permeabilidad magnética negativas; estos materiales han sido motivo de diversas investigaciones durante las últimas décadas; en estos el vector de propagación apunta en una dirección opuesta al vector de Poynting. P. H. Hernández el. Al. [2] demostraron recientemente la posibilidad de inducir la propagación de luz con una velocidad de fase negativa en una película fuertemente anisotrópica. En el presente trabajo se estudia la posibilidad de obtener la propagación de luz con velocidad de fase negativa así como la existencia de las propiedades de autosimilaridad y multifractalidad de las propiedades ópticas en un medio laminado aperiódico. El sistema de multicapas aperiódico que se propone es el de Fibonacci que se construye según la relación de recurrencia  $S_i = S_i$ .  $_1S_{i-2}$  en donde  $S_0 = B y S_1 = A$ . En este caso las unidades A y B son bicapas formadas por un material isotrópico y otro fuertemente anisotrópico cuyos anchos cumplen con la condición de que el cociente de las bicapas A y B sea igual a la razón dorada τ [3]. El análisis numérico de las propiedades del sistema de multicapas de Fibinacci se hace usando el método de la matriz de transferencia [4] y la aproximación racional [5]. Resultados de la reflectividad y de las estructura de mini-bandas muestran la propagación de la radiación electromagnética.

**Agradecimientos.** Trabajo parcialmente apoyado por la VIEP-BUAP, SASX-EXC09-I, México.

#### Referencias

- [1] V. G. Veselago, Usp. Fiz. Nauk **92** 517 (1967); [Sov. Phys. Usp. **10**, 509 (1968)].
- [2] P. H. Hernández, G. Martínez, Gregorio H. Cocoletzi, H. Azucena-Coyotecatl, and J. Díaz-Hernández, J. Appl. Phys., **101**, 093103 (2007).
- [3] R. Merlin, K. Bajema, and R. Clarke, Phys. Rev. Lett., 55, 1768 (1985).
- [4] P. Yeh, Optical Waves in Layered Media, Wiley, New York (1988).
- [5] P. Hawrylak, G. Eliasson, and J. J. Quinn, Phys. Rev. B 36, 6501 (1987).

### Anclaje de dislocaciones de tornillo en GaN nanoestructurado

F. Ruiz-Zepeda<sup>1</sup>, O. Contreras<sup>2,\*</sup>, A. Dadgar<sup>3</sup> y A. Krost<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Km. 107

Carretera Tijuana-Ensenada, 22860 Ensenada B.C., México.

<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo.

Postal 356, C.P. 22800, Ensenada B.C., México.

<sup>3</sup> Otto-von-Guericke Universität-Magdeburg, Institut für Experimentelle Physik, Fakultät für Naturwissenschaften, Postfach 4120, 39016 Magdeburg, Germany.

\* Autor a contactar; e-mail: edel@cnyn.unam.mx.

Palabras clave: Nanoestructuras, Dislocaciones, Semiconductores nitruros del grupo III

Debido a la falta de sustratos de nitruro de galio (GaN), el material semiconductor GaN se crece de manera heteroepitaxial sobre sustratos como Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Si, y SiC. Uno de los inconvenientes en el crecimiento de nanoestructuras de GaN es la alta densidad de dislocaciones en el material (número de dislocaciones por unidad de área). Las dislocaciones generalmente son provocadas por el modo de crecimiento, por la diferencia en los parámetros de red y por la diferencia en los coeficientes de expansión térmica de ambos materiales. Hasta la fecha, se han empleado diferentes métodos para reducir la densidad de dislocaciones en el GaN [1]. En el presente trabajo se estudia el efecto que sufren las dislocaciones extendidas del material por la incorporación de altas concentraciones de silicio en una región precisa de la capa de GaN. En el sitio de inserción, algunos escalones en la superficie asociados a dislocaciones de tornillo son decorados por un colectivo de impurezas que inhiben la propagación del escalón. Esto obliga a la dislocación de tornillo a doblarse sobre el plano basal y a interactuar con otras dislocaciones de tornillo. El escalón asociado a una dislocación de tornillo tiende a atrapar impurezas debido a los enlaces sueltos que posee. Por el contrario, las dislocaciones de borde no sufren las mismas consecuencias pues carecen de escalones en la superficie. En base a las observaciones hechas por microscopía electrónica de transmisión y al análisis de distribución de carga libre a lo largo del escalón, se propone un modelo atómico sobre el efecto del silicio en las dislocaciones de GaN.

**Agradecimientos.** Se agradece la asistencia técnica del Sr. Francisco Ruiz Medina. También se agradece el apoyo del proyecto PAPIIT IN101509.

#### Referencias

[1] J.L. Weyher et al. Appl. Phys. Lett. 95, 031913 (2009).

## Theoretical study of photo-electronic properties of organic donor-acceptor molecules

Erika Ivonne López-Martínez<sup>1</sup>, Luz María Rodríguez-Valdez<sup>2</sup>, Norma Flores-Holguín<sup>1</sup>, Alfredo Márquez-Lucero<sup>1</sup> y Daniel Glossman-Mitnik<sup>1</sup>

Keywords: DFT, electronic transfer, donor-acceptor system.

The field of organic photo-electronic devices, such as light-emitting diodes, field-effect transistors, sensors, lasers and photovoltaic devices is rapidly expanding due to the promise of inexpensive material and device fabrication accompanied by the wide variety of functionality of organic materials. During the last couple of decades, much effort has been put into the development of solar cells based on small organic molecules and conjugated polymers. Organic photovoltaic devices based on heterostructures and bulk-heterojunctions of donor-acceptor materials have opened up a new route for photon-to-current conversion, and can offer a potentially inexpensive alternative to traditional silicon solar cells. Photoinduced electron transfer from semiconducting polymers onto fullerene has been recently discovered, with interesting and unique photophysical properties in those composites.

Photo-electronic properties of donor-acceptor systems comprised of 3-phenylenevinylene (3PV), 4-phenylenevinylene (4PV), fullerene-3-oligo-phenylenevinylene (C60-3PV) and fullerene-4-oligo-phenylenevinylene (C60-4PV) were investigated theoretically by means of Density Functional Theory (DFT). In addition, the electronic properties of pphenylenevinylene oligomeric chains (nPPV, n = 3 to 8 units) were calculated in order to determinate how the increment of spectroscopic units in the oligomer backbone affects their photo-electronic behavior. From these results, structural modifications were proposed in fullerene-oligophenylenevinylene hybrids to improve the electron transference in these systems. The modifications consisted in: a) alter the donor unit, conserving the fulleropyrrolidine structure with no changes by the addition of spectroscopic units in the oligomeric chain, and b) replace the acceptor unit, change the fullerene by a nanotube. The proposed fullerene-hybrids were C60-5PV and C60-8PV and the nanotube-hybrids were NTC3-4PV and NTC9-4PV (NTCx-nPV, x= nanotube length and n= units in the oligomer backbone). In this theoretical study, the effects in the donor-acceptor electron systems by the chemical structure modifications were analyzed. The electronic properties analyzed were: spatial distribution of highest occupied molecular orbitals (HOMO) and lowest unoccupied molecular orbitals (LUMO), ΔE (gap), energy level diagrams of donor-acceptor systems.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Grupo de modelado molecular y Nanomateriales (NANOCOSMO). Miguel de Cervantes 120. Complejo Industrial Chihuahua. Chihuahua, Chih. 31109. México.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Chihuahua. Ave. Escorza y Venustiano Carranza S/N. Chihuahua, Chih. C.P. 31000.

# Effects of impurity scattering on the quantized conductance of semiconductor nanowires with magnetic field

Rubén C. Villarreal S.<sup>1,2,\*</sup>, Francisco Mireles<sup>2</sup>, Ernesto Marinero<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, CICESE

<sup>2</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, CNYN-UNAM, Ensenada BC.

<sup>3</sup> Hitachi Global Storage Technologies, San José California, EUA.

\* rcesar@cnyn.unam.mx

**Key words**: nanowire, quantum point contacts, tight binding approach, Green function formalism, ballistic transport, spin transport, spintronics.

During the last few years the study of electronic transport in nanoscopic devices has attracted considerable attention. In particular, since the discovery of the quantized conductance in quantum point contacts QPC's [1], electron and spin transport through QPC's has been studied with special interest. In a recent experiment done by J.C. Chen et al. [2] have reported the successful measurements of the quantum conductance in a quantum wire defined through e-beam lithography on a GaAs-AlGaAs heterostructure with two embedded OPC's. In their experiment, the inclusion of a chemically etched island-like impurity of nanometric size creates two independent QPC's formed between the edge of the wire and the impurity. The gate controllable electrostatic width of the QPC's allows them to study the quantization of the conductance and the interference effects of electrons emerging from the QPC's. Motivated by this experiment, we model numerically their device and study the behavior of the electron conductance. Using a 2D tight binding approach and a Green's function recursive formalism, we model the nanowire with the embedded QPC's including the effect of an external magnetic field. The electron conductance through the device is then studied within the Landauer theory of ballistic transport. The calculations allow us to reproduce the behavior of the conductance of the experimental system studied by Ref. [2] in the limit of linear response. Moreover, we show that the inclusion of the magnetic field in the simulations induces rather interesting behavior of the conductance. For instance, we predict the appearance of Fano-like resonances on the quantized conductance due to interference (caused by mode mixing) and confinement effects created by the magnetic field and the increasing scattering of electrons with the island-like impurity. We will discuss on the practical manipulation of such Fano-like resonances and the possible use for magnetoresistive devices.

#### **Referencias:**

[1] van Wees, B.J. et al., Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988).

[2] Chen J.C. et al., Appl. Phys. Lett. **94**, 012105 (2009).

## Resonant and non-resonant microwave absorption study of the Verwey transition in Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles

H. Montiel<sup>1\*</sup>, G. Alvarez<sup>2\*</sup>, M. Castellanos<sup>3</sup>, R. Zamorano<sup>4</sup>

Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico de la Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 DF, México.

<sup>2</sup>Departamento de Materiales Metálicos y Cerámicos, Instituto de Investigaciones en Materiales

de la Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 DF, México. <sup>3</sup>Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, 04510

DF, México.

<sup>4</sup>Departamento de Ciencias de los Materiales, Instituto Politécnico Nacional, U.P.A.L.M. Edificio 9, Av. Instituto Politécnico Nacional S/N, 07738 DF, México.

\* herlinda m@yahoo.com, memodin@yahoo.com

Keywords: Nanoparticles of magnetite, ferromagnetic resonance, Verwey transition,

We have investigated the Verwey transition by resonant and non-resonant microwave absorption techniques: Ferromagnetic Resonance (FMR) and low-field microwave absorption (LFA). Measurements were carried out on samples Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> with size particles of 20 nm, at X-band (8.8-9.8 GHz). The temperature measurements were recorded in the 90-300 K range. In these techniques, the microwave response with modulation (100 kHz) on an applied dc magnetic field ( $H_{dc}$ ) is measured. In FMR spectra,  $H_{dc}$  could be varied from 0 to 8000 G. LFA measurements were carried out as a function of  $H_{dc}$  in symmetric field-sweeps in the  $-1000 \text{ G} \leq H_{dc} \leq +1000 \text{ G}$  range. A clear evolution of FMR lineshape was observed as a function of temperature, and which is related with the passage through the Verwey point (~123 K). We observed in LFA measurements a lineal component with a positive slope and hysteretic traces, where the disappearance of lineal component and a minimum in the hysteresis loop was observed at 125 K, and which can be associated with a minimum in magnetic anisotropy. These results suggest that the magnetization dynamics is influenced by the electronic nature of the metal-insulator transition mecanism and the structural transition at Verwey transition. By comparing the FMR and LFA temperaturedependence, it seems that this phenomenon is also related with an anisotropy decrease in the neighborhood of the Verwey transition, due to a charge rearrangement. Below the transition temperature, the anisotropy increases due to an additional contribution to magnetostriction that appears as a consequence of a distorted cubic phase [1]; therefore, the hysteresis becomes wider.

#### Acknowledgements

The authors acknowledge the support from project PAPIIT IN116608.

#### References

[1] J. P. Wrigth, J. P. Attfield and P. Radaelli, Phys. Rev. B, 66, 214422 (2002)

## TÓPICO III. EDUCACIÓN Y DIVULGACIÓN DE LA NANOCIENCIA Y LA NANOTECNOLOGÍA

#### **CEDM-79**

### Easy to make paper models of carbon nanostructures

R. Carrera-Flores, G. Frías-Villegas, D. Venegas-Suarez-Peredo and V. A. Basiuk\*

Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior C.U., 04510 México, D.F., Mexico;

\* Author for correspondence; e-mail: basiuk@nucleares.unam.mx

**Keywords:** Models, Paper, Origami, Carbon Nanosctructures, Carbon Nanotubes, Chirality, Defects

**Abstract.** Structural models of carbon nanostructures including fullerenes, carbon nanotubes (CNTs), nanohorns, etc., are as important for teaching and research in nanoscience as in any other area of modern chemistry and material science. However, the usual, commercially available plastic molecular models do not work well in the case of carbon nanostructures mentioned above. The reason is the spherical curvature of fullerenes and cylindrical curvature of CNT sidewalls, which makes the hybridization of carbon atoms adopt an intermediate state between  $sp^2$  and  $sp^3$ . At the same time, molecular models are contemplated for the pure hybridization states, are not flexible enough, as well as the modeling kits rarely include a large number of building blocks sufficient to construct large nanostructures such as CNTs. A good and affordable solution to overcome this problem is the use of easy-to-make paper origami models, which was recently proposed to build fullerenes, fulleroids and related small carbon nanoclusters [1-3]. In the present work, we further explore the possibility to use origami technique to model more extended and sophisticated structures, including chiral and bifurcated nanotubes, their structural defects, as well as nanohorns, toroids, spirals, etc.

#### References

- [1] R. Gurkewitz and B. Arnstein, *Multimodular Origami Polyhedra: Archimedeans, Buckyballs and Duality*; Dover Publications, 2003.
- [2] http://www.uv.es/mabegaga/fullerenos/
- [3] http://www.uaq.mx/matematicas/origami/galeria4.html

### **INDICE DE AUTORES**

A 1 37 11 M D 140 140	G G 20	E / 1 M 100
Acedo-Valdez M. R., 142, 149	Carrasco C., 38	Estrada M., 100
Acosta García Ma. C., 179	Carrascosa J. L., 38	Estrada Rivera R., 77
Almonaci C., 79	Carrera-Flores R., 212	Evangelista H. V., 177
Alonso G., 187	Carrillo Beltrán M., 173	Farías M.H., 133, 134, 147, 166
Alonso-Núñez G., 93, 185	Castellanos M., 38, 211	Favier I, 95
Alvarez G., 143, 211	Castillón F.F., 100, 147, 156, 177,	Felipe C., 172
Alvarez M., 45, 80, 82, 84, 86	184	Ferrer J., 206
Alvarez-Zauco E., 189, 193	Castillo-Quiñones E., 111	Flores González M.A., 140, 141
Amaya Corona G., 77	Castro D., 164	Flores-Holguín N., 209
Amelines-Sarria O., 119, 190	Castro-Longoria E., 76, 142, 146,	Franco M, 179
Angeles-Islas J., 143	149, 165	Frías-Villegas G., 212
Araya-Pochet J., 164	Catalan J., 77	Fuentes S., 68, 100
Arellano A., 45, 84	Chabanov A., 67	Galaviz Pérez J.A., 89
Arroyo S., 80	Chalé-Lara F., 133, 134	Gallardo-Vega C., 164, 169
Aruela A.A., 77	Chávez F., 172	Galvan D.H., 102
Arzate N., 202	Chávez García M. L., 181	Galván M., 86
Ascencio J.A., 35	Chávez Hernández K.V., 150, 159	García Bórquez A., 121
Avalos A., 79	Chavez J., 104	García Díaz R., 120
Avalos M., 76, 142, 146, 149,	Chávez J.A., 175	García Gutierrez R., 150, 159
	Chávez-Castellanos A.E., 108	García-García R., 110
157, 165, 166, 187		
Avalos Marrón E., 145	Chavira E., 106, 139, 170	Garzón I.L., 69
Avalos Pérez A., 179	Chen C., 67	Glossman-Mitnik.D., 209
Avila García A., 121	Chen I., 63	Goiz O., 172
Avilés J., 84	Chen PY., 63, 163	Gómez Cortés A., 114, 115
Ayon A., 67	Chigo Anota E., 135	Gómez M, 95
Badillo García A.N., 127	Cocoletzi G.H., 74, 116, 118, 120,	González-Carrazco A., 99
Baptista R., 77	127, 136, 207	González-Vigi F., 114
Baptista Rosas R.C., 104	Collins G., 67	Gracia y Jimenez J.M., 203
Barrera A., 147	Contreras López O.E., 150, 159,	Guerrero R., 73
Barreto J., 170	196, 208	Gurin V., 166
Basiuk E.V., 189, 192, 193, 194	Contreras Puente G., 64	Guzmán Reyes D.L., 145
Basiuk V.A., 119, 189, 190, 191,	Contreras-Torres F.F., 192, 193	Hackworth R., 67
192, 193, 212	Cota E., 71	Harsh M., 55
Bassiouk M., 191	Cota-Araiza L., 164, 169	Hernández Pérez M.A., 140, 141
Batina N., 40, 97, 125, 179	Cruz J., 132	Hernández-Cocoletzi H., 135, 136
Benitez G.A., 119	Cruz-Ruiz G., 108	Hernández-Espinosa M.A., 160
Bernal R., 204, 205	Cruz-Vázquez C., 204, 205	Herrera Rodríguez F., 137
Bizarro-Sordo M., 189	Dadgar A., 208	Herrera-Zaldivar M., 92, 99, 160
Blum B., 119	Damian-Matsumura P., 40	Herron Montaño W., 201
Bogdanchikova N., 77, 79, 104,	Daniel-Pérez N., 141	Hirata G., 77
111, 157, 166	Dávila Rubio O.R., 75	Hirata G.A., 63, 156, 163
Bonilla-Cruz J., 198	De la Cruz L., 106	Huerta-Escamilla C., 133, 134
Borbón-Nuñez H.A., 205	De La Cruz W., 123, 128, 130,	Huirache-Acuña R., 93
Borkovskaya O.Y., 194	160, 161, 164, 169, 206	Huitzil-Tepanecatl A., 74
Bottini M., 44	De Pablo Galán L., 181	Iriqui-Razcón J.L., 204
Brown F., 205	De Pablo P. J., 38	Jayanthi N., 132
Bucio L., 147	Delgado Ramos G.C., 50	Juanico A., 121
Burmistrov V., 79	Díaz G., 114, 115	Juárez-Ramírez I., 113
Bustos J., 86	Dmitruk N.L., 194	Karakastani S., 131
Caballero R., 139, 170	Dorantes Rosales H.J., 89, 140,	King D.A., 131
Cabrera J.L., 90	141	Kolokoltsev Y., 190
Cadena Méndez M, 179	Dos Santos Claro P.C., 119	Kotha R., 67
Calderón H.A., 143	Douas M., 38	Krost A., 208
Camacho C., 121	Driver S., 131	Lara Cruz C., 40
Camarena J.P., 187	Eguía-Eguía S., 93	Lara-Ceniceros T.E., 153
Campa-Molina J., 147	Elam D., 67	Lee S., 63
Carbajal Arízaga G.G., 150, 159	Escobedo-Morales A., 99	Leticia González Núñez, 40
Cardoza M., 167	Espinoza Gómez J.H., 187	Licea A., 37
Cardoza IVI., 107	Espinoza Comez J.H., 10/	LICCA A., 3/

Licea-Jiménez L., 153 Pandiyan T., 132 Sánchez-Vázquez M., 198 Linares Salgado J.E., 56 Paoli A., 54 Saniger J.M., 35 Patakfalvi R., 145 Schilardi P.L., 119 López G., 130 López R.H., 172 Payán S.R., 163 Schuller I., 49 López T., 45, 80, 82, 84, 86 Pérez Gravas H., 179 Segura A., 125 López-Martínez E.I., 209 Pestryakov A., 166 Sepúlveda S., 167 López-Torres A., 110 Petranovskii V., 160, 177, 184 Serena P.A., 38, 58, 70 López-Vinasco A., 95 Pineda Martínez E., 77 Severiano-Carrillo F., 203 Plascencia-Villa G., 35 Luviano Valenzuela U.A., 201 Simakov A., 100, 177 Maldonado I., 71 Platero G., 71 Siqueiros J.M., 147 Ponce A., 103 Mamykin S.V., 194 Smolentseva E., 100 Manjarrez J., 80 Ponce-Cazares I., 161 Somanathan R., 187 Manjarrez M., 86 Portillo R., 160 Soto G., 130, 152, 195 Soto Tapiz M.I., 173 Marinero E., 66, 170, 210 Posada Amarillas A., 102 Marqués M.I., 38 Prieto-López L.O., 206 Suárez-Vázquez S.I., 113 Puente-Lee I., 193 Márquez-Lamas U., 153 Susarrey-Arce A., 92, 157, 160, Márquez-Lucero A., 209 Pusateri J., 67 Martin E., 95 Quevedo-Lopez M.A., 65 Takeuchi N., 74, 116, 118, 120, Martín O., 128 Quintana Melgosa J.M., 137 127, 136 Martínez E., 80, 84 Quintana P. J. E., 111 Tamayo Pérez U., 201 Quintanar C., 106, 139, 170 Martinez-Diaz A., 172 Tapia-Tapia M., 40 Quirino Barreda C.T., 52, 108, Martínez-López M.A., 187 Tejeda E.M., 156 Tiznado H., 128, 130, 152, 187 Martínez-Loran E., 189 110 Martínez-Rodríguez M., 195 Ramírez M. A., 179 Torres S., 106 Martínez-Ruiz A., 195, 196, 201 Ramírez O.T., 35 Tougaard S., 164, 169 Mateu M. G, 38 Ramírez-Camacho M.C., 157 Tuzovskaya I., 166 Ugalde M., 139, 170 McKittrick J., 63, 163 Ramon Gallegos E., 40 Reves-Gasca J., 110 Ulloa-Godínez S., 147 Mejía J.E., 202 Mejía S., 102 Rivera Arzola P., 140, 141 Valdez Núñez K.P., 123 Méndez-Blas A., 203 Rivera-Muñoz E., 90, 93 Valdez Salas B., 173 Meyers M.A., 63, 163 Robles-Belmont E., 87 Valenzuela-Benavides J., 92, 99 Meza-Laguna V., 193, 194 Rodríguez A., 86 Valenzuela-Muñiz A.M., 185 Rodríguez Iznaga I., 177, 184 Vargas E., 100 Miki-Yoshida M., 185 Vargas García J.R., 89 Miranda Pascual M. G., 181 Rodríguez-Galván A., 192 Vargas-Rodríguez M., 175 Miranda R., 38, 175 Rodríguez-García C.E., 156 Mireles F., 210 Rodríguez-Valdez L.M., 209 Vazquez Duhalt R., 43 Molina D., 84 Rodriguez-Ventura G., 111 Vazquez-Nava R.A., 202 Monsalvo Vázquez R., 181 Rogel-Hernández E., 187 Velázquez R., 90, 93 Rojas F., 73 Montes de Oca Valero J.A., 89 Vélez-López E., 187 Rojas Iñiguez F., 61 Veloz M.A., 132 Montiel E., 132 Montiel H., 143, 211 Rojas-Oviedo I., 108, 110 Venegas M.A., 97 Morales de la Garza L., 131 Romero M.T., 116 Venegas-Suarez-Peredo D., 212 Moreno Armenta M.G., 137 Romeu D., 103 Vera Hernández C. J. M., 46 Moreno-Velásquez, S. D., 146 Rosabal B.C., 184 Verde-Gómez Y., 185 Mosqueda De la O K., 196 Rosales I., 147 Viana Castrillón L., 60 Muñoz Picone E., 170 Rubert A.A., 119 Vilchis-Nestor A. R., 76, 142, Rueda G., 121 146, 149, 165 Muñoz Saldaña J., 123 Ruiz-Zepeda F., 208 Naumenko D.O., 194 Villanueva Ibáñez M., 140, 141 Nieto A., 106 Ruterana P., 103 Villarreal R., 210 Salazar Villanueva M., 135 Nieto-López I., 198 Villavicencio J., 71 Noguez-Méndez N.A., 108 Saldaña X.I., 207 Vinck D., 87 Novitskaya E., 63 Saldívar-Guerra E., 198 Wing C., 102 Ochoa-Olmos O.E., 193 Salgado G.G., 203 Xiao M., 133, 134 Odegova G., 79 Salinas Ramírez A., 77 Yacamán J. M., 102 Olazaba J., 128 Salmón M., 175 Yubero F., 206 Olivas A., 167 Salvarezza R.C., 119 Zaca-Morán P., 172 Oviedo M. J., 42 Samano E. C., 42 Zaldívar-Cadena A.A., 113 Pal U., 99 Sancén Contreras F., 52 Zamorano R., 143, 211 Zanella R., 115 Palomares L.A., 35 Sánchez-Mora E., 172, 203 Palomino-Rojas L.A., 118 Sánchez-Vázquez A., 113 Zlatev R., 173

Segundo encuentro interdisciplinario sobre los avances reales, promesas e implicaciones de la nanotecnología en México y el mundo. Participan especialistas nacionales y extranjeros de las ciencias naturales y exactas, ciencias sociales y humanidades, del sector empresarial y de la esfera política, entre otros.

NanoMex'09 invita al III Taller de nanociencias y nanotecnología para principiantes, así como al curso avanzado Nanomateriales: propiedades básicas y aplicaciones, ambos se realizarán el lunes 9 de noviembre de 2009.

### Ejes temáticos

- \* Nanociencia y nanotecnología en biología y medicina
  - \* Energía y medio ambiente
  - \* Nanomateriales
  - \* Nanociencia y nanotecnología en agricultura, ganadería y alimentación
  - \* Eco-toxicidad y regulación de nanomateriales, y estandarización
  - \* Aspectos éticos, sociales y legales de la nanotecnología
- \* Educación y divulgación de la nanociencia y la nanotecnología

