

innovate

Boletín trimestral del Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada



Pozol:
**BEBIDA
PREHISPÁNICA**

CIENCIA DE MATERIALES
con computadoras y
mecánica cuántica:
su impacto en la sociedad

No. 9
Octubre - Diciembre, 2022.

**SEMINARIO
DIVULGACIÓN**
Multidisciplinario

WWW.CICATAQRO.IPN.MX



CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIA APLICADA Y TECNOLOGÍA AVANZADA UNIDAD QUERÉTARO

El Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada (CICATA-IPN Querétaro), se ubica en la Ciudad de Querétaro en el Estado de Querétaro, México. Perteneció al Instituto Politécnico Nacional, es un centro de investigación científico y tecnológico, concebido para servir de enlace entre la comunidad científica y los sectores productivos de bienes y servicios, para atenderlos y ofrecerles soluciones a sus problemas de desarrollo.

Para el cumplimiento de este objetivo, CICATA-IPN Querétaro desarrolla programas de investigación científica y tecnológica con un enfoque interdisciplinario y, de igual forma, atiende la formación de recursos humanos de alto nivel contribuyendo decisivamente al fortalecimiento de la calidad y la competitividad nacional e internacional del aparato productivo en México.

En relación al trabajo de investigación el CICATA-IPN Querétaro ha realizado una gran cantidad de proyectos vinculados con apoyo económico del IPN, CONACYT y la Industria por lo que se han generado patentes, modelos de utilidad, prototipos y diversos desarrollos en sus 5 diferentes líneas de investigación, como son: Análisis de imágenes, Biotecnología, Mecatrónica, Energías alternativas y Procesamiento de materiales y manufactura, las cuales están ligadas con la actividad económica de la región y del país.

Actualmente, en el CICATA-IPN, Querétaro, se desarrollan los programas de posgrado con Maestría y Doctorado, estos programas se han mantenido en el Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) del CONACYT, desde su ingreso en el 2007, en la actualidad su status es de Consolidado para ambos programas. Así también, se cuenta con la Especialidad y además con los tres programas en su modalidad con la industria.

Del año 2003 que se tuvo a los dos primeros graduados en nuestro Posgrado en Tecnología Avanzada al mes de diciembre de 2022, se han graduado 375 alumnos los cuales son: 97 de doctorado, 267 de maestría y 11 de especialidad. Nuestra matrícula en el semestre B22 es de 68 alumnos.

DIRECTORIO

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

Arturo Reyes Sandoval
Director General

Ing. Arq. Carlos Ruiz Cárdenas
Secretario General

Dra. Laura Arreola Mendoza
Secretaria de Investigación y Posgrado

Ricardo Monterrubio López
Secretario de Innovación e Integración Social

CICATA, QUERÉTARO

Juan Bautista Hurtado Ramos
Director del CICATA, Qro.

Edith Muñoz Olin
Subdirectora de Innovación Tecnológica

INNOVATE

Edith Muñoz Olin
Alejandra Castillo Martínez
Adela Eugenia Rodríguez Salazar
Editoras

Alma Lucero Flores Ramírez
Diseño editorial y fotografía

Innovate, Año 2022, No. 9, octubre-diciembre 2022, es una publicación trimestral editada por el Instituto Politécnico Nacional a través del Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, Unidad Querétaro. Cerro Blanco 141, Col. Colinas del Cimatarío, Querétaro, Qro., México, C.P. 76090. Teléfono: 442 2290804 ext. 81002. <https://cutt.ly/9SyKmf>, Editor responsable: Juan Bautista Hurtado Ramos. Reserva de Derechos al Uso Exclusivo del Título No. 04-2021-111710235500-102. ISSN: en trámite, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este número, Unidad de Tecnología Educativa y Campus Virtual del CICATA Unidad Querétaro del IPN, Alejandra Castillo Martínez, Cerro Blanco 141, Col. Colinas del Cimatarío, Querétaro, Qro., México, C.P. 76090, fecha de la última modificación 16 de diciembre de 2022.

Las opiniones expresadas por los autores no necesariamente reflejan la postura del editor de la publicación.

Queda estrictamente prohibida la reproducción total o parcial de los contenidos e imágenes de la publicación sin previa autorización del Instituto Politécnico Nacional.

@cicataqro.ipn 

@cicataqro 

@cicataqro 

Cicata Querétaro 

EDITORIAL

Ya muy dentro de nuestro regreso de la pandemia, en el IPN siguen dándose eventos de alto impacto. Los esfuerzos para incrementar la colaboración internacional del Instituto se han multiplicado quedando solo pendiente incrementar la difusión de oportunidades entre el alumnado, así como la perfecta coordinación en tiempos y fechas, situaciones que suelen perfeccionarse con el paso del tiempo.

En este periodo se llevaron a cabo varios eventos de participación de nuestra comunidad, recién pasada la carrera 11 K todavía quedaban comentarios que hacer a principios de octubre. Como siempre, es muy emotivo verse envuelto en un evento que reúne a tantos politécnicos y amigos de los politécnicos, todos con gran entusiasmo por recuperar estas actividades colectivas que abonan al sentimiento de pertenencia y comunidad.

Inmediatamente después, y a partir de haber retomado la colaboración con otras instituciones educativas del estado, a través principalmente de la COEDUQ y la COEPES, nos tocó participar en la carrera interuniversitaria, que se llevó a cabo en las instalaciones de la UTEQ. Nuestro burrito blanco realizó su mejor esfuerzo para representarnos dignamente en la carrera de mascotas, diversión y entusiasmo diría yo que fueron las palabras que marcaron esta convivencia, estamos listos ya para disfrutar la siguiente edición.

Además de las celebraciones internas, como la del día de muertos, en las que la comunidad, cada vez más unida, participó con alegría, dejando recuerdos que seguramente perdurarán por mucho tiempo, participamos en la Noche de las Estrellas, celebración que año con año se ha venido celebrando desde hace ya 19 años a partir de la colaboración con la Embajada de Francia en México. Así mismo el CICATA QRO participó en la 1ª Feria de las Ciencias del Estado de Querétaro, antes conocida como Expocyteq, nuevamente nuestros profesores y estudiantes presentaron actividades de divulgación de la ciencia dirigidas principalmente a los niños, como todos los años, resultó conmovedor volver a ser testigos del asombro que los pequeñines externalizan sin problema ante las demostraciones que se preparan para ellos.

De regreso a las actividades presenciales, sigamos procurando dar lo mejor de nosotros en favor de los ciudadanos mexicanos, que con su trabajo sostienen esta gran institución, que existe por y para ellos, recordemos que somos los encargados de devolver a nuestra sociedad los profesionales mejor capacitados, los desarrollos tecnológicos más necesarios y el desarrollo científico de vanguardia que requiere para evolucionar hacia un mejor futuro.

Juan B. Hurtado Ramos



Personal y alumnos 2009.

INDICE

1	Pozol: BEBIDA PREHISPÁNICA	6
2	CIENCIA DE MATERIALES con computadoras y mecánica cuántica: su impacto en la sociedad	8
3	SEMINARIO DE DIVULGACIÓN Multidisciplinario	14
4	Programa de POSGRADO	19
5	EGRESADOS, octubre - diciembre 2022	20
6	EVENTOS IPN - CICATA Querétaro	22

La revista INNOVATE es un esfuerzo de la comunidad del CICATA Querétaro para dar a conocer las actividades académicas, los eventos relevantes y algunas opiniones que se gestan al interior de nuestro Centro. Es una revista de divulgación, en la que tratamos de transmitir al gran público lo que sucede al interior de una institución dedicada a la investigación, a la formación de investigadores y a acercar el producto de su trabajo a la sociedad, así como nuestra opinión respecto de las cosas que suceden en nuestro entorno, de los avances científico-tecnológicos dondequiera que se produzcan estos y de los fenómenos naturales que nos afectan y resultan de interés para nuestros conciudadanos.

Le agradecemos a nuestros investigadores de la comunidad del IPN, alumnos y a todos los que participan directa e indirectamente en esta revista, por su generosidad para enriquecerla. Tenemos el propósito de ofrecer en cada número temas de interés, mejorar su presentación y aumentar su alcance, con la idea de que, en el futuro cercano, sea un medio reconocido de difusión de la ciencia.

POZOL: BEBIDA PREHISPÁNICA

Martínez-Ortiz Cecilia¹, Morales-Sánchez Eduardo², Gaytán-Martínez Marcela^{1,*}

¹ Investigación y Posgrado en Ciencias de los Alimentos, Facultad de Química, UAQ, Centro Universitario, Santiago de Querétaro Qro, C.P. 76010, México.

² Instituto Politécnico Nacional, CICATA-Unidad Querétaro



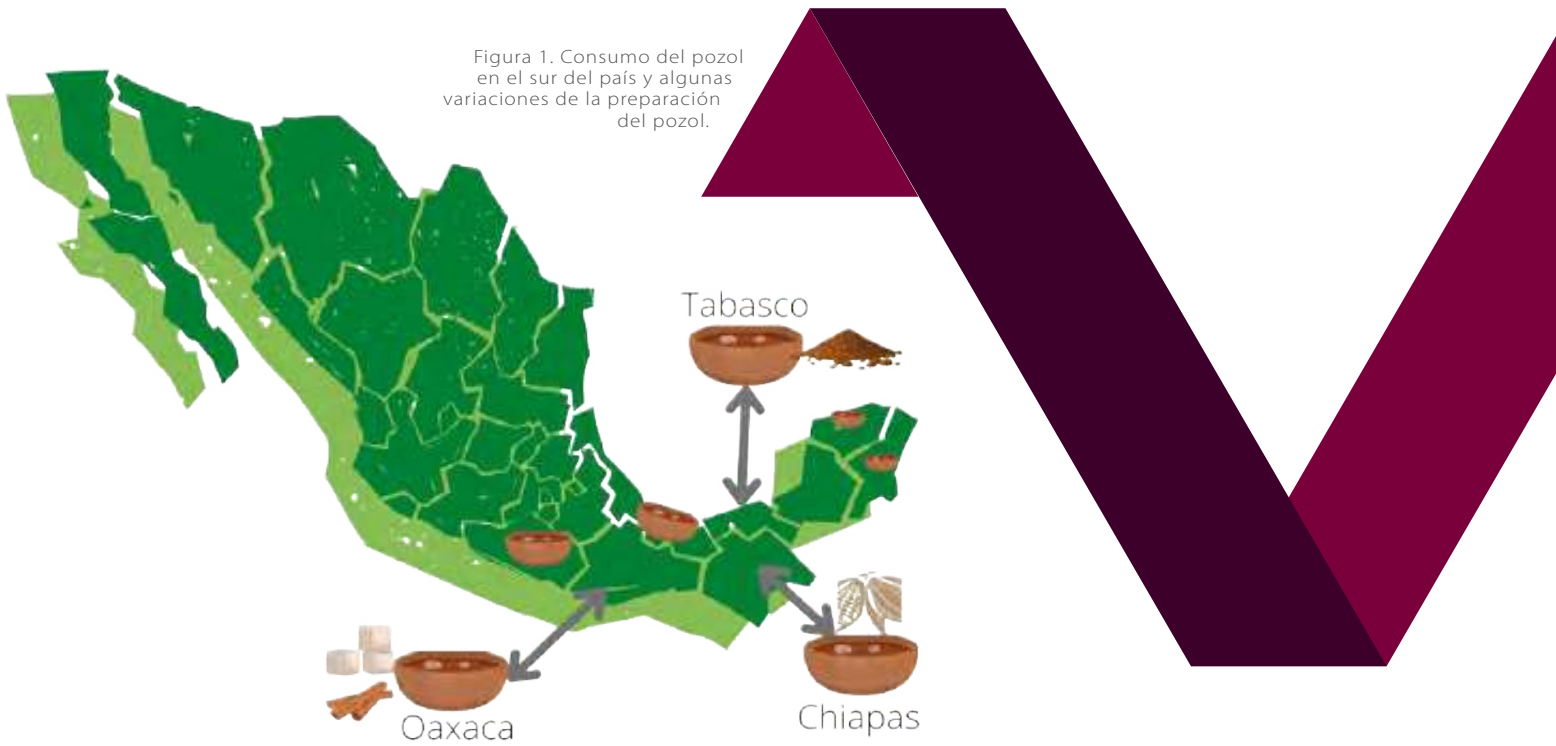
La palabra pozol proviene del náhuatl pozolli, que quiere decir espumoso, es una bebida tradicional que se obtiene de una fermentación no alcohólica a partir de la masa nixtamalizada. Los inicios del pozol se remontan a la cultura maya, debido a que representaba una ofrenda importante a los Dioses y espíritus para pedir salud y buenas cosechas. Por otra parte, el pozol se consideraba una fuente de nutrientes para los mayas además de tener propiedades medicinales (Rojo Leyva et al., 2022). Con lo cual, a través del tiempo el pozol se fue incorporando a la dieta cotidiana de muchos mexicanos como una bebida desarrollando, generando así importancia cultural, social y económica en el país. El consumo del pozol se acostumbraba principalmente en el sur del territorio mexicano en los estados de Guerrero, Chiapas, Oaxaca, Yucatán, Veracruz, Tabasco y Quintana Roo, sin embargo, hoy por hoy su consumo se está ampliando a otras regiones del país (Newell et al., 2021; Robledo-Márquez et al., 2021).

Existen dos formas de elaboración del pozol. La primera es utilizando la masa nixtamalizada recién molida y esta se mezcla con agua para obtener el pozol fresco.

Y la segunda, es mediante la fermentación de la masa nixtamalizada durante un tiempo definido (Jenatton y Morales, 2020; Jiménez Vera et al., 2010). Aunque, el pozol fermentado fue la bebida predilecta de las antiguas culturas prehispánicas, su elaboración puede presentar variaciones en cada región debido a la adición de diferentes ingredientes. En Chiapas, el pozol se prepara añadiendo cacao (*Theobroma cacao*), mientras que en Tabasco se agrega cacao tostado y en Oaxaca se añade azúcar, canela y semillas de mamey tostadas molidas. Otros ingredientes que se pueden incorporar al pozol son arroz (*Oryza sativa*), camote (*Ipomoea batatas*), coco (*Cocos nucifera*) leche y algunas esencias aromáticas (Jiménez Vera et al., 2010).

La elaboración de esta bebida tradicional es artesanal e inicia con el cocimiento de los granos de maíz con cal y agua para después dejar reposar el maíz y lavar varias veces hasta que los granos queden limpios. Después, los granos de maíz se someten a una molineta para obtener masa nixtamalizada. Luego, se forman bolas de masa, las cuales son cubiertas y almacenadas en hojas de plátano para continuar con el proceso de fermentación. Las condiciones para la fermentación son temperatura ambiente y el tiempo de fermenta-

Figura 1. Consumo del pozol en el sur del país y algunas variaciones de la preparación del pozol.



ción de la masa puede durar algunas horas o hasta 30 días, esto depende de las condiciones climáticas y de las preferencias de los productores (Figura 2) (Ojeda-Linares et al., 2021). Generalmente, el pozol se sirve en jícaras para conservar su frescura y su venta es común en mercados locales, puestos ambulantes, restaurantes de comida tradicional, entre otros, del sur y sureste de México.

Actualmente, se están desarrollando varias investigaciones para dar a conocer al pozol fermentado como un alimento nutritivo con propiedades probióticas. Esto con base en estudios previos que han identificado principalmente bacterias ácido lácticas como microorganismos probióticos en el pozol. De esta forma, el pozol pertenece a los alimentos prehispánicos con una gran importancia nutricional, cultural y económica.

REFERENCIAS

Jenatton, M., y Morales, H. (2020). Civilized cola and peasant pozol: young people's social representations of a traditional maize beverage and soft drinks within food systems of Chiapas, Mexico. *Agroecology and Sustainable Food Systems*, 44(8), 1052–1088.

Jiménez Vera, R., González Cortés, N., Magaña Contreras, A., y Corona Cruz, A. (2010). Evaluación microbiológica y sensorial de fermentados de pozol blanco, con cacao (*Theobroma cacao*) y coco (*Cocos nucifera*). *Revista Venezolana de Ciencia y Tecnología de Alimentos*, 1(1), 70–80.

Rojo Leyva, V. M., Reyes Utrera, J. L., y González Márquez, S. L. (2022). Bebidas tradicionales de los pueblos indígenas de México. Instituto Nacional de los Pueblos Indígenas. <https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/758128/Libro-Bebidas-tradicionales-de-los-pueblos-indigenas-INPI.pdf>

Newell, G. E. N., Reyes-Escutia, F., Bolom-Martínez, S. del C., y Gutiérrez-Gallegos, E. U. (2021). The pozol de cacao drink in its presence in the Zoque carnival of San Fernando, Chiapas: A biocultural analysis with reflections for modern society. *Revista de Alimentación Contemporánea y Desarrollo Regional*, 31(57), 1–9

Ojeda-Linares, C., Álvarez-Ríos, G. D., Figueredo-Urbina, C. J., Islas, L. A., Lappe-Oliveras, P., Nabhan, G. P., Torres-García, I., Vallejo, M., y Casas, A. (2021). Traditional fermented beverages of Mexico: A biocultural unseen foodscape. *Foods*, 10, 1–31.

Robledo-Márquez, K., Ramírez, V., González-Córdova, A. F., Ramírez-Rodríguez, Y., García-Ortega, L., y Trujillo, J. (2021). Research opportunities: Traditional fermented beverages in Mexico. Cultural, microbiological, chemical, and functional aspects. *Food Research International*, 147, 1–20.



Figura 2. Elaboración del pozol fermentado.

CIENCIA DE MATERIALES

CON COMPUTADORAS Y MECÁNICA CUÁNTICA: SU IMPACTO EN LA SOCIEDAD

Juan Ignacio Rodríguez
Profesor investigador del CICATA, Querétaro

Si tuviéramos que calificar a la sociedad actual con un adjetivo que la caracterizara de manera especial podríamos denominarla la “sociedad de la tecnología” o quizá la “sociedad de las telecomunicaciones”; pero si pensamos más fundamentalmente la podríamos llamar la “era de los nuevos materiales”. Esta aseveración está basada en el hecho de que, si observamos con detenimiento cada dispositivo usado en cualquier aplicación tecnológica, nos encontramos que está hecho completamente o en parte por nuevos materiales, es decir, por materiales que no existían en la naturaleza, si no que fueron sintetizados artificialmente por el ser humano. Un ejemplo clásico de estos nuevos materiales son los plásticos (polímeros). Es probable que los jóvenes y niños, que ya nacieron en la era del plástico, no imaginan que éste es un material hecho en un laboratorio mediante una reacción química; quizá no imaginan que, hasta el año de 1907, año de creación del primer plástico llamado baquelita (ver Figura 1), no existía un solo plástico sobre la Tierra ¡ni en el universo!. Otro material artificial que impacta en nuestra sociedad son los cerámicos los cuales podemos encontrar en los accesorios para baños, algunas partes de aviones y automóviles; encontramos los cerámicos en todo tipo de procesos a alta temperatura. Si consideramos que las medicinas son al fin y al cabo un material, en cuanto está hecho de materia, en este caso moléculas orgánicas, se puede concluir que prácticamente todas las medicinas actuales (la sustancia activa de

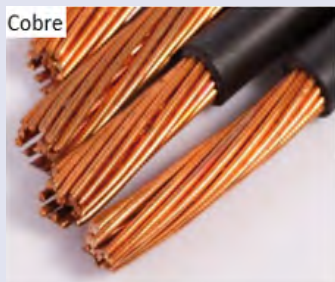


Figura 1.
Ejemplos de materiales naturales como el cobre, calcita (CaCO_3), pirita (FeS_2); y materiales artificiales o sintéticos como el acero, la baquelita y el PET (Tereftalato de polietileno).

¹ Como es bien sabido, toda la video es una forma muy amena de aprender sobre las propiedades: <https://www.youtube.com/watch?v=...>

cápsulas, jarabes, gel, etc.) son nuevos materiales creados por el hombre.

Desde la creación de los primeros materiales sintéticos, los científicos han continuado con esa tarea creando materiales con propiedades muy especiales, requeridas y predefinidas para satisfacer las demandas de las nuevas tecnologías. La creación de la última generación de estos materiales se lleva a cabo mediante una actividad teórica-experimental, donde el material a crear primeramente es "diseñado" mediante simulaciones teórico-computacionales y después es sintetizado y procesado en laboratorios. Este artículo tiene como principal objetivo resaltar la importancia de uso de las simulaciones computacionales en el estudio, diseño y creación de materiales en el área que se conoce como "Ciencia e Ingeniería de Materiales".

CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

La ciencia e ingeniería de materiales (CIM) es un área de investigación multidisciplinaria cuyo principal objetivo es el descubrimiento y diseño de nuevos materiales. [1-2] La Figura 2(a) muestra un esquema que se ha utilizado para explicar de forma gráfica las partes fundamentales que constituyen la CIM.

Uno de los vértices del tetraedro de la Figura 2(a), especifica la estructura. Por estructura, se entiende la forma en particular en que están arreglados los átomos en el material.¹ Sucede que, la estructura impacta de manera fundamental en las propiedades del material (otro vértice del tetraedro). El ejemplo clásico de este hecho son los materiales diamante y grafito, los cuales están formados por los mismos átomos (carbono) pero con estructura diferente. En la Figura 3(a) se muestra una fotografía de cómo se ven estos materiales a simple vista (vista macroscópica).

En la Figura 3(b) se muestra la estructura de cada material a nivel atómico (vista microscópica). En estos dos materiales podemos apreciar la influencia de la estructura sobre las propiedades del material. Todos hemos tocado el grafito (el material gris oscuro en la punta de los lápices). El grafito es tan suave que se deshace y se adhiere al papel cuando el lápiz es presionado contra él (incluso lo podemos deshacer entre los dedos). El diamante es diametralmente opuesto pues no solo no es suave, sino que es muy, muy duro. En realidad, el diamante es el material más duro que existe en la actualidad. Ni con una herramienta de acero podríamos raspar o cortar al diamante, solo con otro diamante

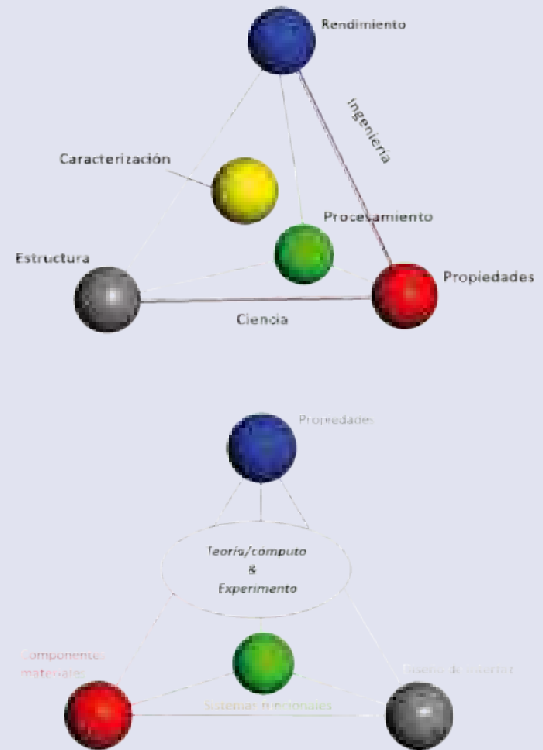
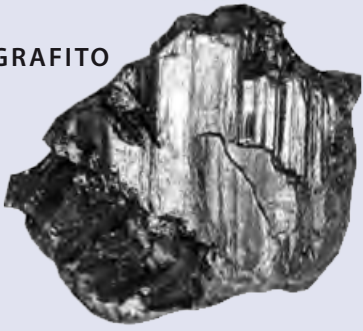


Figura 2.

- a) Esquema de tetraedro con las principales partes de la CIM.
- b) Esquema de tetraedro especificando la rama teórica computacional como complemento de la rama experimental.

podríamos hacerlo. En la actualidad existe un área de investigación para crear materiales "super duros", cuya dureza se acerque o rebase a la del diamante. Cabe remarcar aquí que la correlación entre la estructura y las propiedades de un material se tiene en general para todos los materiales tanto naturales como sintéticos. Este ejemplo del diamante y el grafito, también nos sirve para introducir el tema de propiedades (otro vértice del tetraedro de la Figura 2(a)). El tercer vértice representa el procesamiento o la síntesis del material, es decir, el proceso de "fabricación" del material. Existen muchos procesos (químicos, metal- mecánicos, físicos, etc..) para fabricar un material. El cuarto componente de la CIM trata con el "rendimiento" que el material tiene en cierta aplicación tecnológica de interés. Por ejemplo, si estamos interesados en fabricar un nuevo combustible para los autos que supere a la gasolina, el rendimiento lo mediremos en kilómetros por litro, es decir, cuantos kilómetros el automóvil va a recorrer al consumir un litro de combustible. Para que el nuevo combustible pudiera ofrecerse comercialmente, su rendimiento tendría que ser mayor que la gasolina (aunque el material fuera más caro) o al menos igual (si el nuevo combustible fuera más barato que la gasolina). Así, en cada aplicación, el rendimiento del material se debe cuantificar y comparar con los materiales existentes para decidir si se empieza a comercializar o no. En el

GRAFITO



a)

DIAMANTE

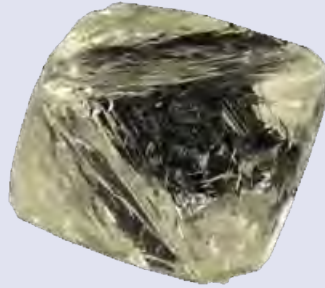


Figura 3.

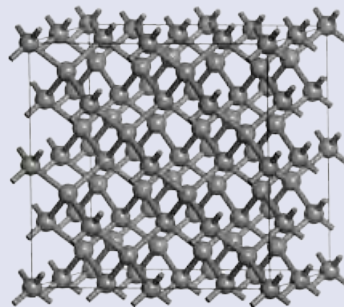
(a) Fotografías (macroscópicas) del diamante y el grafito.
(b) Estructura atómica (fotografía microscópica) del diamante y el grafito.

esquema del tetraedro (Figura 2(a)), la “caracterización” se simboliza por el círculo amarillo en el centro. La caracterización es la medición y registro sistemático de las propiedades de un material. Esta caracterización se encuentra regularmente en bases de datos en el caso de materiales conocidos o en artículos de investigación si estos materiales son relativamente nuevos (ver, por ejemplo, la base de datos del NIST: <https://www.nist.gov/>). Al fabricar un nuevo material, uno de los primeros pasos a seguir es caracterizarlo para saber “qué tipo y qué propiedades (características) tiene el material”. Para caracterizar un material actualmente se cuenta con una lista larga de equipo sofisticado como lo microscopios electrónicos, los rayos X, espectrómetros, equipo de análisis químicos, etc. Un material puede ser caracterizado vía su estructura (caracterización estructural, propiedades, rendimiento, entre otros. Es por esta razón que la caracterización se coloca en el centro del tetraedro, pues puede estar relacionada con uno o varios componentes de la CIM. Actualmente, a partir del advenimiento de las computadoras, un material también puede ser caracterizado de manera teórica al calcular sus propiedades mediante simulaciones computacionales. Esto está simbolizado en el tetraedro de la Figura (2b), mediante las etiquetas “Teoría/cómputo”. La teoría, explotada mediante software especializado y las computadoras, ha llegado a ser parte muy importante de la CIM, lo cual es descrito de manera más detallada en la siguiente sección.

CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES COMPUTACIONAL

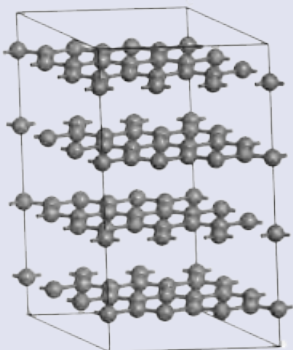
Como cualquier otra ciencia, la CIM ha tenido un proceso de evolución a lo largo de la historia del ser humano. Consideremos que el ser humano ya hacía CIM al fabricar utensilios de materiales obtenidos empíricamente como el bronce o el acero. Un ejemplo sorprendente es el de los Romanos, que ya conocían la “ciencia” de fabricación del cemento, el cual usaron eficientemente en sus colosales y sorprendentes monumentos arquitectónicos ¡hoy en día seguimos usando “Cemento Romano” en nuestras supermodernas construcciones!. Desde esos tiempos antiguos hasta quizá los siglos XVII-XIX, cuando los fundamentos de la física clásica fueron desarrollados (Mecánica de Newton y la termodinámica, especialmente) el principal proceso para desarrollar nuevos materiales o mejorar los existentes era el proceso empírico de “prueba y error”. En este proceso, un nuevo material se creaba basado en el conocimiento empírico; entonces, el material se probaba en cierta aplica-

Estructura del diamante



b)

Estructura del grafito



ción de interés esperando mejorar el rendimiento. Sin embargo, no siempre se mejoraba el material y se tenía que probar otra idea, así hasta que a “prueba y error” se obtenía un material mejorado (en el mejor de los casos). Este proceso se muestra como el Primer Paradigma del esquema de la Figura 4, el cual nos muestra gráficamente la imagen global de la evolución de la CIM. [3]

En el Segundo Paradigma, la Ciencia Teórica, la Física Clásica principalmente, complementa y mejora la técnica del Primer Paradigma. Por ejemplo, sabemos que nuestro material (macroscópico) debe satisfacer las leyes de la termodinámica, este conocimiento ahorra muchos procesos de prueba y error mediante el mejor diseño de los experimentos ¡no podemos reinventar la rueda!. El Tercer Paradigma se plantea con los cálculos cuánticos (Teoría de funcionales de la densidad y Dinámica Molecular), que no es otra cosa que la aplicación de la Física Moderna, en particular la Mecánica Cuántica, al estudio de los materiales. Para solucionar las ecuaciones de la Mecánica Cuántica se usan las computadoras, pues los métodos de solución son muy complejos, matemáticamente hablando (ver siguiente sección).

Los métodos del Tercer Paradigma se pudieron usar solamente a partir del invento de las computadoras, y se consideran como métodos modernos en la CIM que permiten diseñar los nuevos materiales (ver siguiente sección). El Cuarto Paradigma es el uso de la Ciencia de Datos y la Inteligencia Artificial en el diseño de los nuevos materiales. En particular, las técnicas de Aprendizaje Automatizado (“Machine Learning”) están siendo aplicadas a resolver problemas de gran complejidad que

no pueden ser abordados por los métodos computacionales del tercer paradigma. Cabe resaltar que los métodos del cuarto paradigma son utilizados o construidos a partir de los datos obtenidos de los tres primeros paradigmas. Se consideran que estos métodos del cuarto paradigma son “la última generación” de los métodos computacionales aplicados al diseño y creación de nuevos materiales modernos.

MECÁNICA CUÁNTICA Y SIMULACIONES COMPUTACIONALES

Cualquier material sea natural o artificial está compuesto por átomos. La Figura 5 muestra simbólicamente que pasaría si pudiésemos ver la materia con un microscopio usando más y más aumentos hasta llegar a su estructura atómica.

Este proceso lo podemos hacer con cualquier material (sólidos cristalinos, amorfos, moléculas, nanomateriales, etc.) y en cualquier estado de agregación (gas, líquido, sólido, gel, plasma,

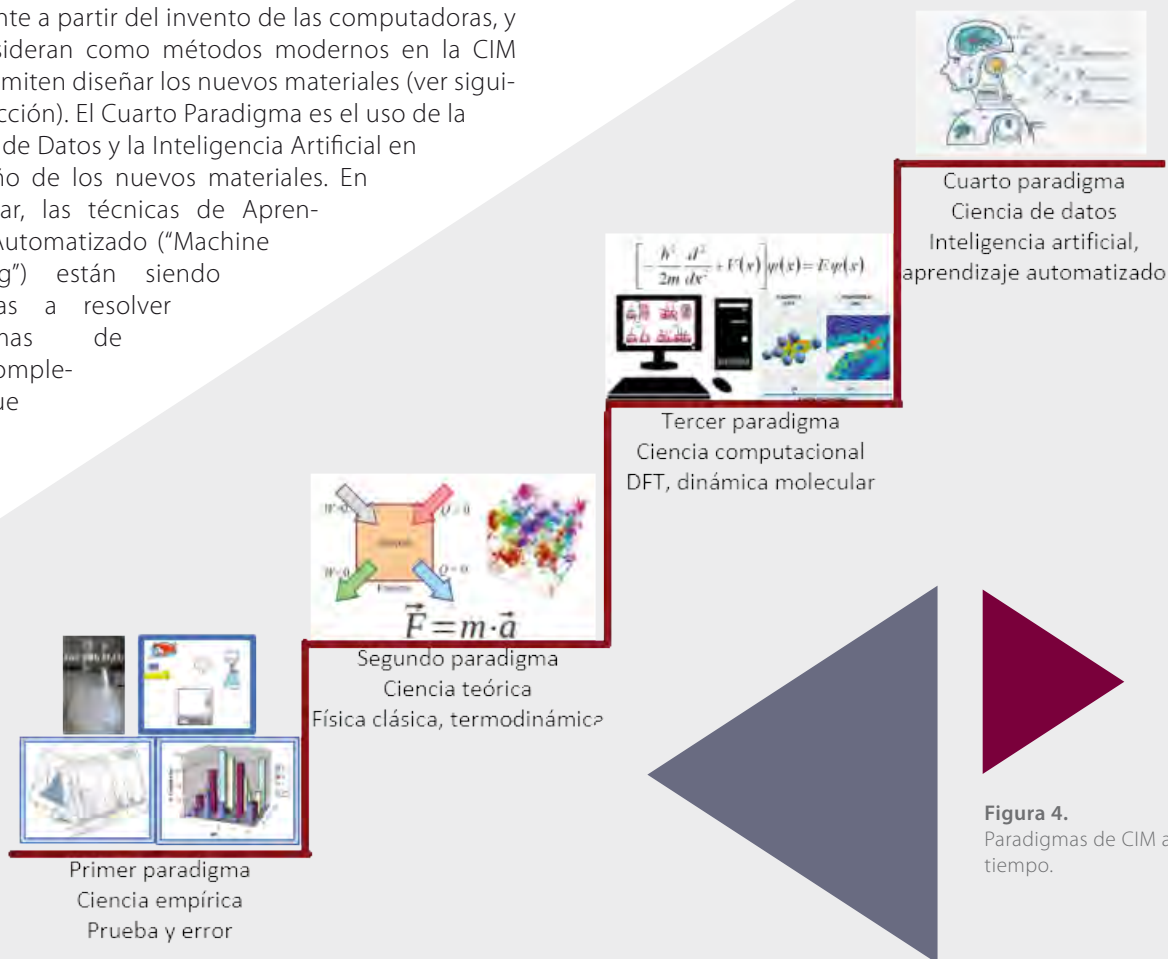


Figura 4. Paradigmas de CIM a través del tiempo.

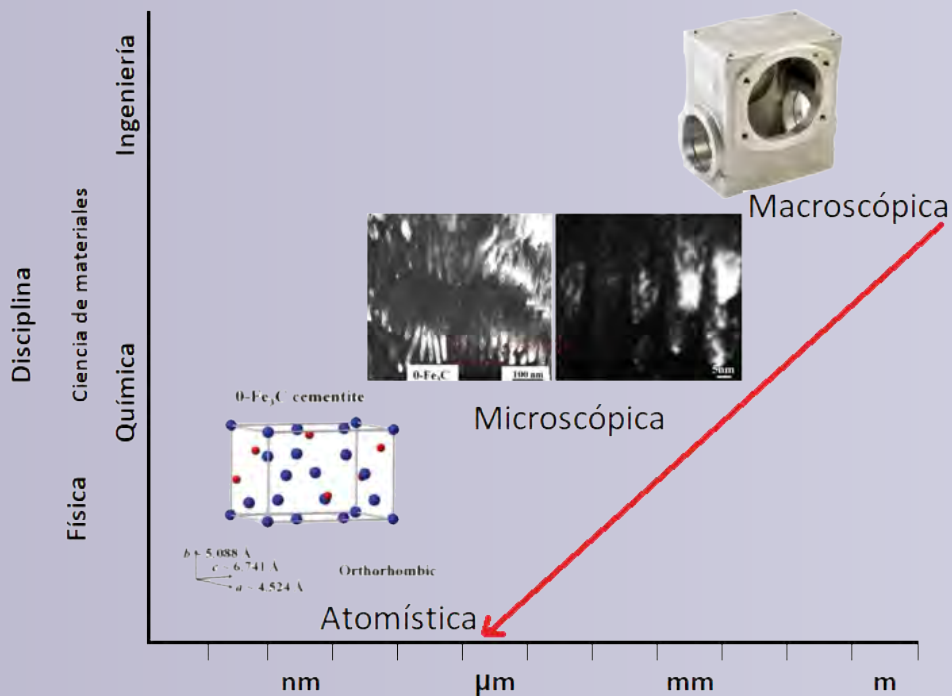


Figura 5. La materia en las escalas macroscópica (m =metro), microscópica ($\mu m = 10^{-3}$ metros- $m\mu = 10^{-6}$ metros), y atómica ($nm = 10^{-9}$ metros).

etc.). La figura 5 nos recuerda que se pueden estudiar y calcular las propiedades de cualquier material a nivel atómico. Sucede que los átomos y las moléculas se rigen por la así llamada Mecánica Cuántica, la cual es un área de la Física Moderna [4-6]. Aunque la Mecánica Cuántica (MC) es una ciencia compleja y muy abstracta, el proceso para aplicarla al estudio de los materiales se puede entender en general; pues, tiene mucha similitud a otras áreas de la ciencia e ingeniería donde el modelo matemático del sistema de estudio en cuestión, en este caso un material, se expresa en términos de ecuaciones diferenciales. En el caso de la MC, la ecuación diferencial en cuestión es la famosa ecuación de Schrödinger (ES), cuya expresión matemática simplificada puede verse en la Figura 6.

La forma de usar la ecuación de Schrödinger es la siguiente: 1) Se "escribe", siguiendo las reglas de la MC, el llamado operador Hamiltoniano \hat{H} asociado al

material de estudio en cuestión, que en este caso es el fulereno C60. 2) Se inserta \hat{H} en la ecuación de Schrödinger y entonces el problema se convierte en un problema matemático. Está bien establecido que el resolver la ES para un material es un problema matemático muy complejo que solamente puede ser resuelto con la ayuda de software especializado usado en computadoras y/o las llamadas supercomputadoras. Con la ayuda de software/computadora se obtiene la función de onda Ψ , y de Ψ , todas las propiedades de la materia (en este caso el C60). Mediante una simulación computacional se pueden predecir las propiedades de los materiales. Debido a esta capacidad de predicción, con simulaciones computacionales basadas en la MC, se pueden crear o diseñar nuevos materiales, con propiedades específicas, antes de ser creados en un laboratorio. Algunos medicamentos contra la influenza (Tamiflu ©) ya han sido diseñados mediante simulaciones computacionales [7].

MATERIALES PARA EL MUNDO REAL: REFINACIÓN DE LA GASOLINA

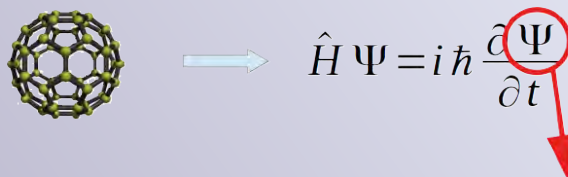
En nuestro grupo de investigación de "Modelación Molecular" (CICATA-Querétaro-IPN), estamos en colaboración con grupos experimentales que están atacando problemas de frontera como la creación de celdas solares plásticas o catalizadores nanoestructurados para la refinación de la gasolina, en particular, para aumentar el grado de octanaje en las gasolinas [8-9]. El grado de octanaje está relacionado con el grado de pureza y eficiencia (en términos de Km/litro) de la gasolina. En la Figura 7 podemos ver algunos de estos materiales en su forma macros y microscópica.

La colaboración entre los grupos experimentales y teóricos en el IPN permitirá el diseño de nuevos materiales catalizadores nanoestructurados para la mejor refinación de la gasolina. Los principales resultados de esta colaboración fueron reportados en dos artículos de investigación [10-11] y en una tesis doctoral [12].

REFERENCIAS

1. W. D. Callister, D. G. Retwisch. "Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach". Third Edition. John Wiley & Sons. U.S.A. (2008)
2. W. D. Callister. "Materials Science and Engineering: An Introduction" Sixth Edition. John Wiley & Sons. U.S.A. (2003).
3. Z. Li et al. "Machine learning in concrete science: applications, challenges, and best practices". Npj Computational Materials 8, 127 (2022).
4. D. J. Griffiths. "Introduction to Quantum Mechanics". Third Edition. Cambridge University Press, UK (2018).
5. Ira N. Levine. "Quantum Chemistry", Sixth Edition. Pearson Prentice Hall. USA (2009).
6. D. I. Blokhintzev. "Quantum Mechanics". Gordon-Breach, N. Y. (1964).
7. J. C. Dyason and M. Von Itzstein. "Anti-Influenza Virus Drug Design: Sialidase Inhibitors". Aust. J. Chem. 54, 663 (2001)
8. M. L. Hernandez-Pichardo et al., "High-throughput study of the iron promotional effect over Pt/WO_x-ZrO₂ catalysts on the skeletal isomerization of n-hexane," Appl. Catal. A Gen., vol. 431–432, pp. 69–78, (2012).
9. P. del A. Montoya de la Fuente, J. A., M. L. Hernández-Pichardo, "Isomerización de n-heptano empleando catalizadores de Pt/circonia-tungstatada," Rev. Mex. Ing. Química, vol. 11, no. (3), pp. 439–445, (2012).
10. J. Vera-Iturriaga, K. G. Madrigal-Carrillo, M. L. Hernández-Pichardo, J. I. Rodríguez, E. Jiménez-Izal, and J. A. Montoya de la Fuente, "A size-selective method for increasing the performance of Pt supported on tungstated zirconia catalysts for alkane isomerization: a combined experimental and theoretical DFT study" New J. Chem., vol. 45, no. 23, pp. 10510–10523, (2021).
11. K. G. Madrigal-Carrillo, J. I. Rodríguez, M. L. Hernández-Pichardo, and Elisa Jiménez-Izal, "Unraveling the effects of Fe and Mn promoters on the tungstated zirconia catalyst : A DFT study" Applied Surface. Science 599, 154052 (2022) (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433222015902?via%3Dihub>).
12. Karina Gabriela Madrigal Carrillo. "Estudio teórico de las propiedades estructurales, electrónicas y catalíticas de clusters de WOX soportado sobre superficies de ZrO₂". Tesis Doctoral. ESFM-IPN. 2022.

Figura 6. El fullereno C₆₀ también conocido con Buckyball (izquierda). La famosa ecuación de Schrödinger (derecha) donde \hat{H} y Ψ son el operador Hamiltoniano y la función de onda de Schrödinger. Al escribir \hat{H} para el C₆₀, la ecuación se resuelve para obtener Ψ , y de Ψ todas las propiedades del C₆₀ son obtenidas. Y la fotografía de Schrödinger a la edad en que recibió el premio Nobel de Física en 1933 por la creación de la Mecánica Cuántica.



Todas las propiedades de un material se obtienen de la función de onda

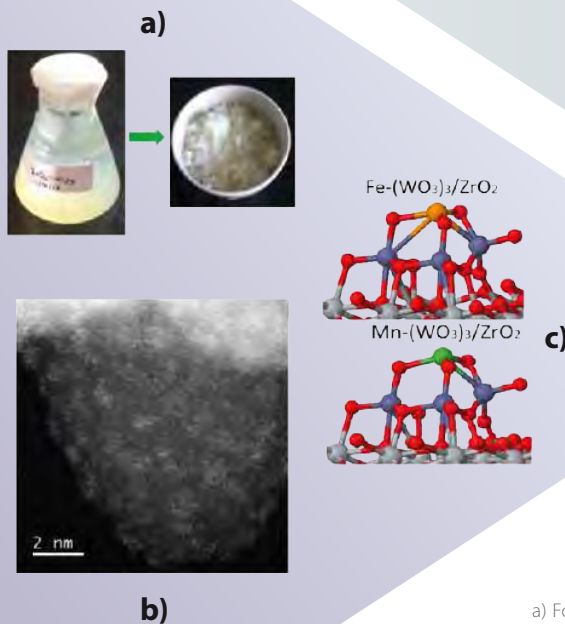


Figura 7.

- a) Fotografía de materiales nanoestructurados catalíticos basados en zirconia tungstatada [10] para eficientar la refinación de la gasolina.
- b) Fotografía de microscopía electrónica de los materiales mostrados en a) [10].
- c) Vista atómica de los materiales mostrados en a) y b) obtenida mediante una simulación computacional. [11-12]



SEMINARIO DE DIVULGACIÓN MULTIDISCIPLINARIO

En el IPN - CICATA Unidad Querétaro además de cumplir con nuestra responsabilidad con la labor científica y tecnológica para el desarrollo económico del país, tenemos el compromiso de acercarnos a la sociedad mexicana y estimular el interés por la ciencia, dando a conocer los esfuerzos en investigación y la gran aventura que implica la búsqueda del conocimiento en las diferentes áreas del saber. Para ello, se desarrolló el Seminario de Divulgación Multidisciplinario (antes Seminario Departamental) a través del cual se da espacio a expertos, investigadores y alumnos de nivel posgrado, para que den a conocer el trabajo científico que se encuentran realizando, expongan los avances en desarrollo tecnológico, y/o expliquen los fenómenos que descubren, así como la forma en que impactan en la sociedad.

En CICATA Querétaro impulsamos la formación cultural científica, por lo que los temas que se abordan en cada uno de los seminarios son explicados de forma sencilla y comprensible, con el fin de ofrecer a la sociedad el conocimiento obtenido mediante el método científico, que contribuya no solo al interés por la ciencia, sino al desarrollo del pensamiento crítico y analítico de los asistentes.

Esta actividad se lleva a cabo en las instalaciones del CICATA Querétaro todos los martes en horario de 17 a 18 horas durante el semestre escolar, por lo que te invitamos a que asistas a nuestros seminarios o sigas nuestras transmisiones en vivo a través de nuestro canal de YouTube: <https://www.youtube.com/c/CicataQueretarolPN>.

Acércate al CICATA Querétaro y descubrirás que la ciencia está al alcance de todos.

Dra. Adela E. Rodríguez Salazar.
Coordinadora del Seminario de Divulgación Multidisciplinario,
Semestre B22.



“NEISSERIA GONORRHOEAE prevalencia y resistencia en México”

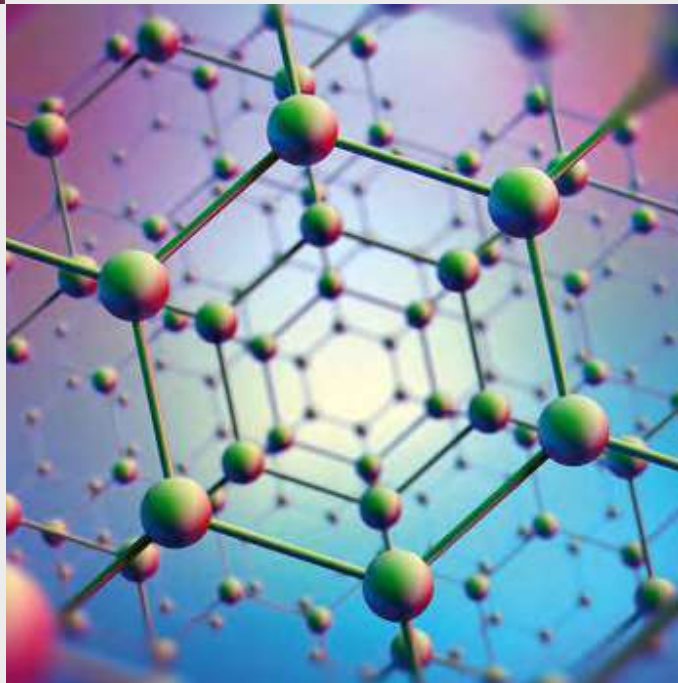
Dra. Ma. Guadalupe Aguilera Arreola,
profesora-investigadora de la ENCB del IPN.
4 de octubre 2022.

Se expone el trabajo en colaboración con la Clínica Especializada Condesa de los servicios de salud de la CDMX y la Clínica de Especialidades Indianilla del ISSSTE, dirigido a la detección temprana de patología cervicovaginal y uretral de origen bacteriano, el diseño de nuevos métodos de diagnóstico de fácil incorporación al laboratorio clínico y el análisis de la microbiota bacteriana uretral.

“Retos y oportunidades en la biosíntesis de nanopartículas de sulfuro de cadmio”

Q.F.B. María Oliva Hernández Jiménez y
Lic. José Daniel Aguilar Loa, estudiantes del
IPN-CICATA Querétaro. 11 de octubre 2022.

Conferencia acerca del estudio de la síntesis de nanopartículas de sulfuro de cadmio desde un enfoque de ciencia básica, que permite conocer y comprender sus propiedades ópticas, eléctricas y químicas, así como identificar los principales factores que las modifican y enfocar su aplicación de acuerdo con sus propiedades fisicoquímicas.



“Recursos educativos abiertos STEAM y prácticas educativas inclusivas, en el marco de la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible”

Dr. Juan José Rodríguez Peña,
profesor-investigador del IPN - CICATA Qro.
18 de octubre 2022.

Conferencia donde se exponen datos de los recursos dirigidos a la educación inclusiva y se plantea la pregunta a analizar: ¿Lograremos incidir, con el aprovechamiento de los recursos educativos abiertos STEAM y las prácticas educativas inclusivas en los indicadores y metas del ODS 4, en estos próximos años?



“Innovación dentro de MABE TYP”

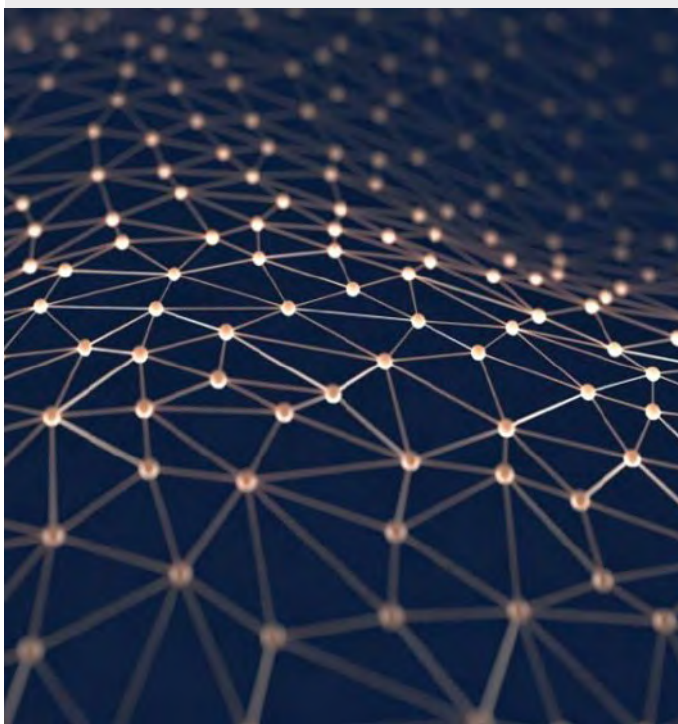
M. en C. César Gutiérrez Pérez Reguera,
Gerente del Departamento de Nuevas
Tecnologías de Innovación.
25 de octubre 2022.

En esta plática se menciona de manera resumida la evolución de algunas de las tecnologías usadas dentro de MABE, también se da una visión de los proyectos en los que se está trabajando actualmente y hacia donde se dirigen, para seguir siendo una empresa de renombre.

“Aplicaciones tecnológicas del almidón resistente”

Dra. Brenda Lidia Contreras Jiménez.
Profesora-investigadora en estancia
posdoctora. 8 de noviembre 2022.

La Dra. Brenda Lidia Contreras Jiménez nos habla del almidón, sus propiedades y del proyecto con el que se espera modificar e incrementar el AR de almidones de diferentes fuentes para su uso en formulación de alimentos con bajo valor glicémico, así como evaluar sus cambios moleculares, propiedades fisicoquímicas y reológicas para diferentes aplicaciones.



“Sensor de fibra óptica para medir desplazamientos nanométricos”

Dr. David Monzón Hernández, investigador
del Centro de Investigaciones en Óptica A. C.
15 de noviembre 2022.

En este seminario se presentan los últimos resultados conseguidos, en el Grupo de Sensores Ópticos y Microdispositivos del Centro de Investigaciones en Óptica A. C., para mejorar el desempeño de un sensor de fibra óptica para medir distancia.



“Materiales catalíticos para la producción de propeno y para la descontaminación de agua”

Dr. Leo Alvarado Perea,
Docente - Investigador de TC en la UAZ.
22 de noviembre 2022.

En este seminario se presentan los avances más relevantes realizados en el área de producción de propeno a partir de eteno (reacción ETP) como molécula materia prima en la industria petroquímica. Se describen las propiedades fisicoquímicas más relevantes de los materiales catalíticos empleados.

“Emociones negativas y su impacto en las conductas de autocuidado y adherencia terapéutica en personas que viven con diabetes tipo 2”

Dra. Laura Mejía Hernández,
coach y educadora en diabetes.
29 de noviembre 2022.

Se habló de la diabetes tipo 2, que requiere un tratamiento integral para su adecuado manejo.

Se plantea que además del tratamiento farmacológico, se considere como estrategia principal el autocuidado y el conocimiento de la carga emocional que conlleva vivir con diabetes, dando seguimiento emocional que es la base para la toma de decisiones en la vida cotidiana.



“Basura Espacial: ¿Hasta dónde vamos a llegar?”

MGI Ana Isabel Sanchis Castillo,
Profesora - investigadora del IPN - CICATA Qro.
6 de diciembre 2022.

Conferencia donde se habla de los desechos orbitales, que incluyen naves espaciales que no funcionan, etapas de vehículos de lanzamiento abandonados, desechos relacionados con misiones y desechos de fragmentación. En este seminario se da un paseo espacial sobre los desechos que la humanidad produce fuera de este planeta y las consecuencias que nos amenazan.



“Altas Capacidades Intelectuales: un reto educativo”

Dra. Martha Beatriz Moreno García,
profesora-investigadora de la UAQ.
13 de diciembre 2022.

En esta plática se habla de las personas con Altas Capacidades y se plantea lo fundamental que es que los profesionales de la educación, de la salud y la sociedad en general estén informados y sensibilizados sobre las altas capacidades para poder enriquecer y orientar su potencial a favor de sí mismos y de la humanidad.

“Diseño y construcción de un brazo robótico humanoide antropomórfico y antropométrico para prótesis”

Ing. Luis Fernando Dzul Maldonado.
Estudiante de posgrado del IPN-CICATA Qro
20 de diciembre 2022.

En la presente ponencia, se exponen los resultados obtenidos del examen comercial y vigilancia tecnológica, hechos a un proyecto tecnológico del CICATA QUERÉTARO, para “diseñar y construir un brazo robótico humanoide antropomórfico y antropométrico para prótesis”. Con dichos resultados, se hace una propuesta final de un proyecto tecnológico más pertinente acorde a las necesidades de las personas de nuestro país disminuidas físicamente.



CICATA QUERÉTARO

Te invitamos a conocer nuestros programas de:

- ESPECIALIDAD
- MAESTRÍA
- DOCTORADO

Consulta nuestros programas [aquí](#).

LINEAS DE INVESTIGACIÓN

- Análisis de imágenes
- Biotecnología
- Energías alternativas
- Mecatrónica
- Procesamiento de materiales y manufactura

SOLICITUD DE DONATIVO

Los aspirantes a ingresar al programa académico deberán cubrir el monto correspondiente al proceso de admisión.

Los aspirantes admitidos deberán formalizar su inscripción al programa sin pago obligatorio alguno, pero con la posibilidad de realizar la aportación voluntaria como donativo por apertura de expediente a la cuenta que les sea indicada por la unidad académica correspondiente. Las cuentas de captación de donativos deberán corresponder a las instancias del Instituto Politécnico Nacional facultadas para el efecto

BECAS

Los alumnos aceptados podrán ser postulados a una Beca CONACyT en caso de cumplir con los requisitos establecidos por este organismo. Además, podrán aspirar a una Beca Estímulo Institucional de Formación de Investigadores (BEIFI) del IPN.

Los interesados podrán consultar la página www.cicataqro.ipn.mx, escribir a posgradoqro@ipn.mx o solicitar informes con la Lic. Araceli Guadalupe Vargas Fuentes a los teléfonos +52 (55) 5729-6000 y +52 (55) 5729-6300 extensiones 81016 o 81050 del Departamento de Posgrado. El CICATA-IPN Unidad Querétaro se encuentra en Cerro Blanco 141, Col. Colinas del Cimatarío, Querétaro, Qro. C.P. 76090.



EGRESADOS

OCTUBRE - DICIEMBRE 2022

MAESTRIA

28/11/2022

ALICIA YANADIRA NAVA FUENTES

“Evaluación del efecto de la realidad aumentada en el modo de conducción de las personas y en sus señales biológicas”

Directores: Dra. Ilse Cervantes Camacho y Dr. Amadeo José Argüelles Cruz.

5/12/2022

JOSÉ DANIEL AGUILAR LOA

“Desarrollo de un método para la detección espectrofotométrica de metales mediante el uso de nanopartículas de CdS sintetizadas a partir de extractos orgánicos fúngicos”

Directoras: Dra. Norma Gabriela Rojas Avelizapa y Dra. Marlenne Gómez Ramírez.

9/12/2022

MARÍA OLIVA HERNÁNDEZ JIMÉNEZ

“Síntesis de nanopartículas de sulfuro de cadmio mediante extractos fúngicos: efecto del solvente y pH”

Directoras: Dra. Norma Gabriela Rojas Avelizapa y Dr. Héctor Reyes Pool.

9/12/2022

EZEQUIEL RUÍZ YÁÑEZ

“Estudio de la diferencia química del sabor de las 3 denominaciones de origen del café mexicano”

Director:
Dr. Pedro Alberto Vázquez Landaverde.





12/12/2022

JESÚS ABRAHAM ROJAS ÚRZULO

“Desarrollo de algoritmos de planificación de trayectorias para la transferencia de objetos”

Directores: Dr. José Joel González Barbosa y Dra. Xóchitl Yamile Sandoval Castro.

15/12/2022

CESAR EDUARDO URIBE LUNA

“Síntesis de red formadora de pulsos de capacitancias iguales por etapa para cargas inductivas”

Directores: Dr. Martín De Jesús Nieto Pérez y Dr. Daniel Hernández Arriaga.



21/12/2022

ERÉNDIRA DALILA VALENZUELA DÍAZ

“Efecto de la gelatinización en medio ácido sobre la estructura y propiedades funcionales de almidón de maíz con diferente contenido en amilosa”

Directores:
Dra. Ma. Guadalupe Del Carmen Méndez Montealvo y Dr. Gonzalo Velazquez De La Cruz.



DOCTORADO

23/11/2022

JHON FREDDY RODRÍGUEZ LEÓN

“Estudio y desarrollo de un nuevo exoesqueleto pasivo para la extremidad superior que permite el alivio muscular y energético en tareas repetitivas de soporte en posición”

Directores: Dr. Eduardo Castillo Castañeda y Dr. Giuseppe Carbone.



EVENTOS

IPN - CICATA QUERÉTARO

PREMIO
AL POLICÍA DEL AÑO
14 de octubre 2022

El Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, IPN-CICATA Querétaro participó como parte del Comité del premio al Policía del Año 2022, galardón que otorga la Cámara Nacional del Comercio (Canaco) en Querétaro con el objetivo de reconocer el trabajo y la dedicación de los elementos de seguridad en favor de la ciudadanía. Con la presencia de Fabián Camacho Arredondo, Presidente de la CANACO Querétaro, Felipe Fernando Macías, Diputado Federal por Querétaro y el Dr. Juan Bautista Hurtado Ramos, Director del IPN-CICATA Querétaro se llevó a cabo la inauguración de la segunda etapa de evaluación del Premio al Policía del año 2022. Donde el IPN-CICATA Querétaro representando a las instituciones académicas, se suma con la aplicación del examen de conocimiento a cien elementos de la zona metropolitana, semidesierto y la Sierra Gorda queretana.



1ER FERIA DE
CIENCIAS QUERÉTARO 2022
18 de octubre 2022

El IPN-CICATA Querétaro, participó en la 1er Feria de Ciencias Querétaro 2022, con el objetivo de impulsar la investigación científica y tecnológica entre los niños y jóvenes, así como fomentar las vocaciones científicas.

ENCUENTRO DE REDES

17,18 y 19 de octubre 2022

Se llevó a cabo el evento Encuentro de Redes, donde se reunieron integrantes de la Red de Energía, la Red de Expertos en Telecomunicaciones y la Red de Expertos en Innovación Automotriz en instalaciones del IPN-CICATA Querétaro, con la finalidad de exponer y seguir colaborando en proyectos de investigación.



CONCURSO DE OFRENDAS Y DISFRACES

26 de octubre 2022

Después de un par de años, en los que debido a la pandemia no se realizaron festejos, se retoma el concurso de ofrendas y disfraces en el IPN-CICATA Querétaro.



1ER CARRERA INTERUNIVERSITARIA

5 de noviembre 2022

El IPN a través del CICATA Querétaro, participó con éxito en la 1er Carrera Interuniversitaria organizada por la Comisión de Calidad Educativa de la COEDUQ-COPARMEX. Los participantes corrieron acompañados de nuestro querido burro blanco, quien fue galardonado por su director, el Dr. Juan Bautista Hurtado Ramos.





Visita a LAVIS UNAM

9 de noviembre 2022

Agradecemos al Laboratorio Nacional De Visualización Científica Avanzada - LAVIS UNAM, por atender la visita de investigación que nuestros estudiantes de posgrado realizaron.

3ER CONGRESO

INTERNACIONAL DE EAS 2022

17 y 18 de noviembre 2022

El IPN-CICATA Querétaro estuvo presente en el 3er Congreso Internacional de Educación Ambiental para la Sustentabilidad 2022, que se llevó a cabo en el Centro de Congresos.



PREMIACIÓN POLICÍA DEL AÑO 2022

1 de diciembre 2022

El Instituto Politécnico Nacional a través del CICATA unidad Querétaro, como Institución evaluadora, felicita y reconoce a todos los policías finalistas en el "Premio al Policía del Año 2022" en su XIII Edición y muy en especial a la Policía Primero de la Secretaría de Seguridad Pública Municipal de Querétaro, Alicia Morales Olguín, quien recibió el primer lugar como Policía del Año 2022.

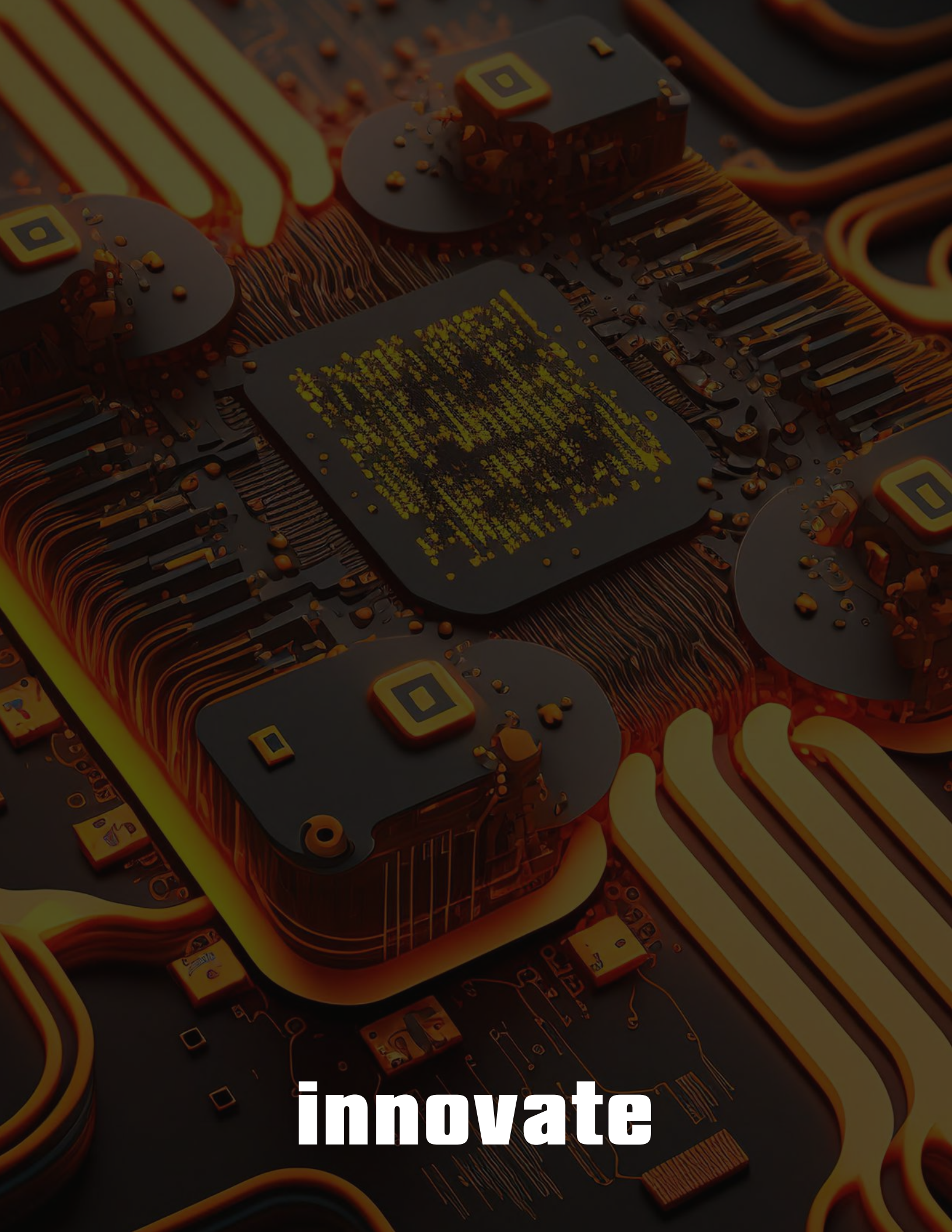


NOCHE DE LAS ESTRELLAS 2022

3 de diciembre 2022

Entre talleres, conferencias, música y telescopios se llevó a cabo la gran fiesta astronómica "Noche de las Estrellas 2022", donde participaron distintas instituciones educativas del Estado de Querétaro.





innovate