



Revista Ciencia Aplicada

ISSN: 3122-3664

WWW.CIENCIAPLICADA.MX

Volumen 1, número 2
julio-diciembre 2025



Director

José Antonio Muñoz Gómez

Consejo Editorial

Abimael Jiménez Pérez

Gabriela Peña Velasco

Eduardo H. Haro


Jaime Ricardo González Romero

Jesús Ortiz Palacios

Omar Aguilar Loreto

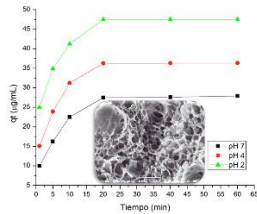
Gustavo Rodríguez Gómez

Revista Ciencia Aplicada, año 1, núm. 2, julio-diciembre de 2025, es una publicación semestral editada por José Antonio Muñoz Gómez, en Ave. Lázaro Cárdenas 320, Lomas de San José, C.P. 48904, Autlán de Navarro, Jalisco, México. Página electrónica de la revista: <https://www.cienciaplicada.mx>, correo electrónico: editor@cienciaplicada.mx. Editor responsable: José Antonio Muñoz Gómez. Certificado de Reserva de Derechos al Uso Exclusivo No. 04-2024-103116484200-102, ISSN: 3122-3664, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este número: José Antonio Muñoz Gómez, Ave. Lázaro Cárdenas 320, Lomas de San José, C.P. 48904, Autlán de Navarro, Jalisco, México, fecha de última modificación: 28 de octubre de 2025. Tamaño del archivo: 7413 KB



Índice

El segundo número de la Revista Ciencia Aplicada, está conformado por cinco artículos donde se explora el conocimiento, desde una perspectiva multidisciplinaria. Su propósito fundamental es tender puentes entre el conocimiento científico y la comunidad en general, acercando la ciencia a todas las personas de una forma clara y accesible. En este número confluyen diversas áreas del conocimiento —física, matemáticas, ciencia de materiales, química y computación—, integrando enfoques tanto teóricos como prácticos. En este contexto, el segundo número de la revista ofrece una visión transversal de la Ciencia Aplicada, contribuyendo a la democratización del conocimiento en México.



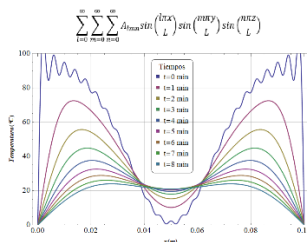
Polímeros de Impresión Molecular: una alternativa innovadora para la remoción selectiva de As³⁺ en tratamiento de agua subterránea 1-10

Itzel Sarahi Aguilar-Flores, Isao Peiro-Suarez, Jesús Ortiz-Palacios



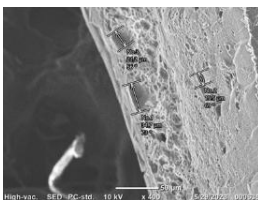
Descubrimiento de exoplanetas mediante aprendizaje automático 11-19

Sandro Garcia-Palomino, Gustavo Rodriguez-Gomez



Modelación matemática del calor en un sólido cúbico mediante aprendizaje automático 20-32

Omar Aguilar-Loreto



Síntesis y caracterización de hidrogeles de PVA-Bórax con conductividad iónica 33-49

Andrea H. del Rio, J. Antonio Muñoz-Gómez, Daniel E. Ramírez-Arreola

Polímeros de Impresión Molecular: una alternativa innovadora para la remoción selectiva de As^{3+} en tratamiento de agua subterránea

Itzel Sarahi Aguilar-Flores, Isao Peiro-Suarez, Jesús Ortíz-Palacios

Departamento de Ingenierías, Universidad de Guadalajara, Av. Independencia Nacional No. 151, Autlán, Jalisco, México

Resumen: Los polímeros de impresión molecular (Molecularly Imprinted Polymers MIPs, por sus siglas en inglés) sintéticos han sido ampliamente estudiados para la remoción de contaminantes orgánicos presentes en aguas residuales. Sin embargo, su aplicación en la eliminación de metales pesados presentes en aguas subterráneas o en efluentes industriales ha sido limitada. En este trabajo se presenta la síntesis de un polímero MIP diseñado para la remoción selectiva de iones de arsénico trivalente As^{3+} en solución acuosa sintética. La plantilla de impresión molecular se preparó mediante la interacción del monómero vinilpiridina, EGDMA (dimetacrilato de etilenglicol) y arsenito de sodio en una mezcla acuosa-acetonitrilo. Las propiedades de adsorción se evaluaron a pH 2, 4 y 7. El polímero MIP mostró una mayor capacidad de remoción en comparación con el polímero sin impresión molecular. Finalmente, estos resultados indican que el uso del polímero MIP es una alternativa viable para el tratamiento de agua contaminada con arsénico trivalente.

1. Introducción

El agua es fundamental para la vida humana y la preservación de la biodiversidad en el planeta. El 97.5 % del agua corresponde a océanos y mares, mientras sólo el 2.5% es agua dulce, de esta fracción apenas el 0.3% está disponible en ríos y lagos. y sólo el 0.025% es agua apta para el consumo humano que proviene de fuentes superficiales y subterráneas. Sin embargo, el incremento en las actividades humanas, el uso excesivo de pesticidas, herbicidas, y la actividad minera han contaminado estas fuentes con metales pesados, entre ellos el arsénico (As) [1].

El arsénico se encuentra de forma natural en muchas regiones del mundo, incluyendo el sur de Asia, Estados Unidos, Canadá, India y Brasil, donde la contaminación en aguas subterráneas es un problema grave. En México, especialmente en el norte, ciudades como Chihuahua, San Luis Potosí, Durango y Coahuila enfrentan serios problemas de arsénico en el agua potable. La exposición prolongada por arsénico es un problema global que puede causar efectos adversos graves en la salud humana como cáncer de piel, trastornos neurológicos, hiperqueratosis, entre otros [1-2].

Uno de los principales desafíos para eliminar el arsénico en el agua es la variedad de las especies químicas, que dependen del potencial redox y del pH. Las especies predominante de arsénico pentavalente As^{5+} son H_3AsO_4 , $H_2AsO_4^-$, $HAsO_4^{2-}$, y AsO_4^{3-} .

mientras que las de arsénico trivalente As^{3+} incluyen H_3AsO_3 , $H_2AsO_3^-$, $HAsO_3^{2-}$ y AsO_3^{3-} . La relación encontrada en el agua de la especie entre As^{5+} y As^{3+} es de 4:1. Las especies de As^{5+} son estables en ambientes aeróbicos, mientras las especies As^{3+} predominan en ambientes moderadamente reductores, como en aguas subterráneas [3-4]. Además, la sal de As^{3+} es 10 veces más soluble en agua y más tóxica para los seres humanos que la sales de As^{5+} [5].

Ante esta situación se han desarrollado diferentes técnicas efectivas para la remoción de arsénico en el agua destinada al consumo humano. Aunque se usan métodos convencionales como intercambio iónico, coagulación, osmosis inversa y biorremediación, muchos son costosos y se enfocan principalmente para eliminar As^{5+} [6-9]. La remoción de As^{3+} es especialmente difícil debido a su especie dominante, H_3AsO_3 , que es una especie neutra y difícil de absorber.

La adsorción se considera un método prometedor debido a su bajo costo, alta eficiencia y facilidad de operación. En particular, los adsorbentes basados en hierro han mostrado gran capacidad para eliminar As^{5+} [10-11]. Recientemente, los polímeros MIPs han surgido como materiales capaces de reconocer y capturar selectivamente moléculas específicas, funcionando de manera similar a un sistema biológico Antígeno-Anticuerpo [12-13]. Los polímeros MIPs se destacan por su alta selectividad, resistencia mecánica bajo diversas condiciones de operación y bajo costo.

La síntesis del polímero MIP consta de tres etapas principales: Formación de la plantilla molecular mediante la interacción química o física de la molécula funcional y el ion metálico. Seguido de la polimerización de la plantilla en presencia de un agente reticulante, y finalmente, la eliminación del ion o molécula impresa para dejar libre los sitios activos, que coinciden en forma, tamaño y geometría de la especie objetivo [14-15]. Así, la superficie del polímero MIP ofrece sitios de reconocimiento accesibles, superando la inaccesibilidad de sitios activos en otros materiales.

En trabajos recientes, Mankar et al., diseñaron un nanopolímero de impresión molecular (NMIP) para la remoción de As^{5+} usando 4-vinilpiridina como monómero funcional, logrando así una remoción del 98% y una capacidad máxima de adsorción de 49.7 mg/g [16]. Por su parte, Jagirani et al., estudiaron la selectividad del As^{3+} con 4-vinilpiridina en una proporción de monómero:ligante de 2:1, alcanzado una remoción del 70% y una capacidad máxima de adsorción de 103.3 mg/g [17].

En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de un polímero de impresión molecular y sus propiedades de adsorción de As^{3+} , las cuales fueron comparado con las propiedades de adsorción de un polímero adsorbente sintetizado por polimerización en precipitación sin impresión molecular. Para este fin, la plantilla molecular se formó mediante la interacción electrostática entre el oxianión de As^{3+} y la piridina protonada. Seguido por la polimerización de los

monómeros y la obtención del polímero MIP. Los parámetros de adsorción se obtuvieron por las isotermas de Langmuir y Freundlich. Así como, el parámetro cinético usando el modelo de pseudo segundo orden. Los resultados mostraron que la capacidad de adsorción de As^{3+} aumenta significativamente al usar el polímero MIP en comparación con el polímero absorbente sin plantilla molecular SIP. La selectividad mostrada impulsa al desarrollo continuo de estos materiales para la remoción eficiente de arsénico trivalente presente en aguas superficiales o subterráneas.

2. Metodología

2.1 Materiales

Los reactivos utilizados en la síntesis del polímero MIP y el polímero sin impresión molecular SIP, así como los reactivos para la determinación cuantitativa de As^{3+} fueron suministrados por Sigma aldrich y por Santa Cruz Biotechnology.

2.2 Preparación del polímero MIP

La plantilla de impresión molecular se preparó modificando la metodología reportada por [19]. En un matraz redondo de dos bocas se mezclaron 5 mL de 4-vinilpiridina (4-VP), 6.0188 g de arsenito de sodio, 15 mL de acetonitrilo, 15 mL de agua y 1.5 mL de HCl, bajo agitación constante. La mezcla se sometió a ultrasonido durante 40 minutos para favorecer la disolución de la sal de arsenito de sodio.

Posteriormente, se añadieron 25 mL de acetonitrilo, 1.25 mL de dimetacrilato de etilenglicol (EGDMA) como agente entrecruzante y azobisisobutironitrilo (AIBN) como iniciador. La mezcla se purgó con nitrógeno gas para crear una atmósfera inerte y se llevó a cabo la polimerización a 80°C por 12 horas. El polímero resultante fue filtrado y lavado con agua destilada. Luego, se sometió a un lavado Soxhlet con metanol durante 6 horas para eliminar residuos de arsénico y monómeros sin reaccionar. Finalmente, el polímero MIP se secó en un horno a 70 °C por 3 horas.

2.3 Preparación del polímero sin impresión molecular (SIP)

La síntesis del polímero sin impresión molecular se realizó siguiendo la misma metodología descrita arriba sin la adición de la sal de arsenito de sodio. En un matraz redondo de dos bocas se adicionó 5 mL de 4-VP, 1.25 mL de EGDMA y 25 mL de acetonitrilo. La mezcla se purgó con nitrógeno gas y se llevó a cabo la polimerización a una temperatura de 80°C por 12 horas. El polímero se filtró y se sometió a un lavado Soxhlet con metanol durante 6 horas.

2.4 Caracterización del polímero MIP

La caracterización del polímero MIP se realizó mediante espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), utilizando un equipo Jasco modelo

FT/IR – 4X. El estudio morfológico se llevó a cabo con un microscopio electrónico de barrido (SEM) JEOL modelo JCM 6000 PLUS. La cuantificación de As^{3+} se determinó mediante espectroscopia UV-Vis en un espectrofotómetro Perkin Elmer modelo lambda XLS.

2.5 Experimentos de adsorción del polímero MIP

Las propiedades de adsorción del polímero MIP se evaluaron mediante experimentos en lotes. Para ello, en viales de 20 mL se adicionaron 0.5 g de polímero MIP y 10 mL de solución de As^{3+} con concentración inicial de 100 mg/L. Las muestras se agitaron en un agitador orbital a baja velocidad por 2 horas hasta alcanzar el equilibrio. Para los estudios cinéticos, se midieron las concentraciones en intervalos de 1, 5, 10, 20, 40 y 60 minutos. Además, se evaluó la adsorción a diferentes concentraciones iniciales de As^{3+} a 50, 100, 200, 300, 500, 800 y 1000 mg/L. La concentración final en equilibrio se cuantificó por espectroscopia UV-Vis [18]. Las pruebas de adsorción se realizaron a pH 2, 4 y 7.

La capacidad de adsorción en equilibrio q_e de los polímeros MIP y SIP fueron calculadas por la expresión.

$$q_e = \frac{(C_o - C_e)V}{m} \quad (1)$$

donde C_o es la concentración inicial (mg/L) y C_e indica la concentración en el equilibrio (mg/L), m y V corresponde a la masa del MIP (g) y volumen de la solución (L), respectivamente.

Los parámetros cinéticos y las propiedades de adsorción se calcularon mediante los modelos matemáticos de las isothermas de Langmuir, Freundlich y el modelo cinético de pseudo segundo orden. El modelo cinético de pseudo segundo orden es expresado por la ecuación:

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{t}{q_e} \quad (2)$$

donde q_t es la capacidad de adsorción en un tiempo t (mg/g), k_2 es la constante de velocidad en (1/min) y q_e indica la capacidad de adsorción de As^{3+} en el equilibrio (mg/g).

La capacidad máxima de adsorción Q_{max} se obtuvo mediante el modelo de la isoterma de Langmuir descrito por la ecuación.

$$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{b \cdot Q_{max}} + \frac{C_e}{Q_{max}} \quad (3)$$

donde C_e es la concentración de As^{3+} en equilibrio (mg/L), q_e es la capacidad de adsorción de As^{3+} en el polímero de impresión molecular (mg/g), Q_{max} corresponde

la capacidad máxima de adsorción del polímero de impresión molecular y b es la constante de Langmuir.

El modelo de la isoterma de Freundlich es expresado por el modelo matemático en su forma lineal por la ecuación.

$$\ln q_e = \ln K_F + \frac{1}{n} \ln C_e \quad (4)$$

donde C_e es la concentración de As^{3+} en equilibrio (mg/L), q_e indica la capacidad de adsorción de As^{3+} en el polímero de impresión molecular (mg/g). K_F y n corresponden a las constantes características del modelo de Freundlich.

3. Resultados

3.1 Caracterización del polímero de impresión molecular MIP

3.1.1 Espectroscopía FTIR

La estructura química del polímero MIP se confirmó mediante la identificación de los grupos funcionales presentes en la estructura. En la Figura 1, se presentan los espectros obtenidos por FTIR del polímero MIP sin activación de los sitios activos generados por la plantilla y se comparó con el polímero MIP activado.

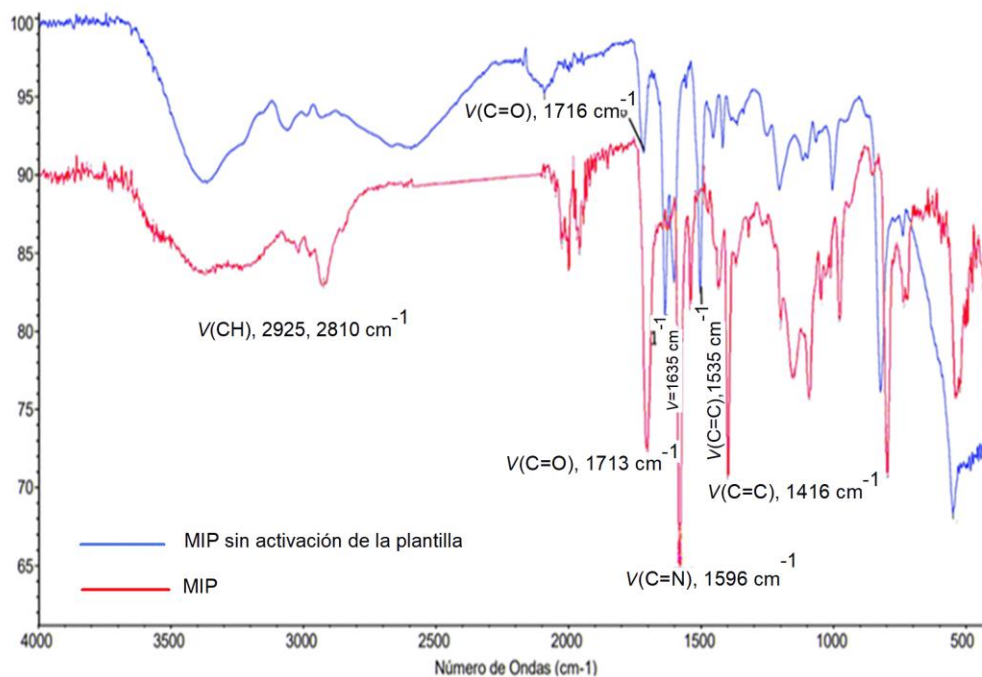


Figura 1. Espectros FTIR, la línea azul sin activación de los sitios de la plantilla de impresión molecular. Línea roja activación de los sitios de la plantilla de impresión molecular MIP.

En el espectro sin activación de los sitios activos de la plantilla molecular, se observan las bandas vibracionales simétricas y asimétricas de los grupos metilo y metileno en 2925 y 2810 cm^{-1} correspondientes a la cadena polimérica y el agente entrecruzante EGDMA. A 1713 cm^{-1} se identifica una banda vibracional del estiramiento del grupo carbonilo $\text{C}=\text{O}$ del EGDMA. Las bandas a 1595 , 1535 y 1416 cm^{-1} son las bandas vibraciones $\text{C}-\text{C}$ del anillo aromático de la piridina. Además, la banda en 1635 cm^{-1} indica la formación del grupo piridinio y el oxianión $\text{N}^+-\text{As}^{3+}$ como resultado de la interacción electrostática durante la formación de la plantilla de impresión molecular.

En el espectro del polímero MIP no se observa la banda en 1635 cm^{-1} , evidenciando la liberación del ion arsénico, y por lo tanto la activación de los sitios activos de la plantilla molecular y la disponibilidad del sitio para la adsorción selectiva del ion As^{3+} [19]. Además, se observan las mismas bandas de los grupos metilo y metileno, del grupo carbonilo y las bandas vibracionales del anillo aromático de la piridina.

3.1.2 Microscopía electrónica de barrido (SEM)

Las micrografías obtenidas por SEM revelan el cambio morfológico del adsorbente antes y después de la activación de la plantilla de impresión molecular. El polímero MIP sin activación presenta poros irregulares con profundidad moderada (Figura 2a). En la activación de la plantilla molecular del polímero, la porosidad del adsorbente aumenta notablemente, con diámetro promedio entre $1.59\text{--}8.12\ \mu\text{m}$ (Figura 2b). El incremento en la estructura porosa se atribuye al efecto del solvente y la lixiviación durante la extracción del arsénico.

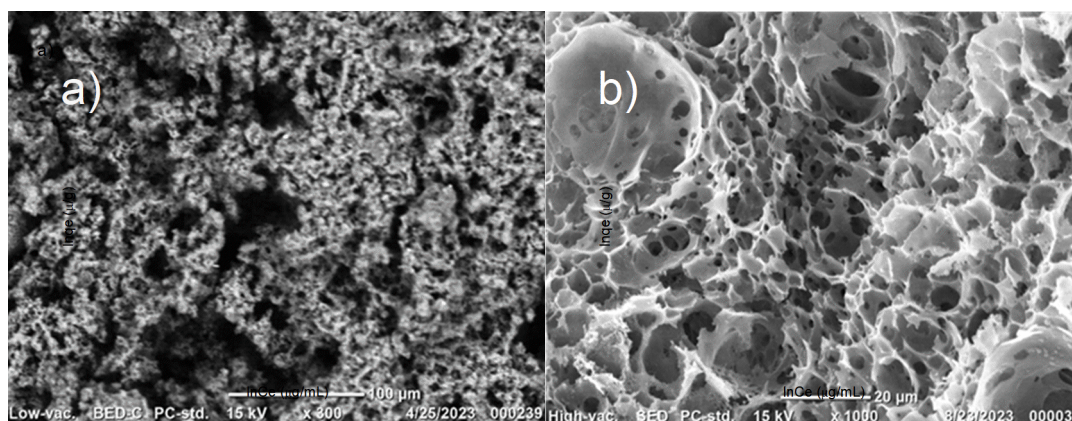


Figura 2. Micrografías obtenidas por SEM del polímero MIP. a) Polímero MIP sin activación de los sitios activos de la plantilla de impresión molecular. b) Después de la activación de la plantilla de impresión molecular previo a su uso

3.2 Propiedades de adsorción del polímero MIP

Los datos de la concentración final obtenidos por espectroscopía UV-Vis fueron usados para calcular la capacidad de adsorción q_e empleando la ecuación (1). La q_e del polímero MIP se comparó con el polímero obtenido sin impresión molecular. Los datos de la capacidad de adsorción de polímero MIP y SIP se presentan en la Tabla 1. En la Figura 3a, se observa el comportamiento de la capacidad de adsorción del polímero MIP a diferentes pH y a diferentes tiempos de contacto. El polímero MIP y la solución de As^{3+} alcanzaron el equilibrio termodinámico a los 20 minutos de contacto. A pH 2, el polímero MIP exhibió una q_e de 47.7 mg/g, mientras a pH 7 una $q_e = 26$ mg/g. El polímero SIP a pH 2 mostró una q_e de 13.69 mg/g y a pH 7 una q_e de 4.07 mg/g. El polímero MIP presentó más capacidad de remoción de As^{3+} , el cual se le atribuye a la selectividad de los sitios activos generados en la plantilla del adsorbente, así mismo, al incremento de los grupos piridinio, favoreciendo así la selectividad hacia las especies de As^{3+} [14, 19].

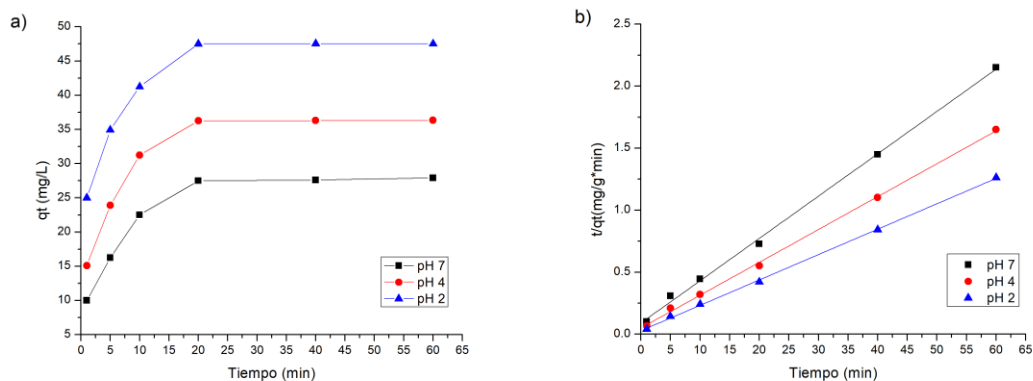


Figura 3. a) comportamiento en la capacidad de adsorción a diferentes pH y diferente tiempo de contacto. b) Ajuste lineal del modelo cinético de pseudo segundo orden a pH 2, 4 y 7.

Para comprender el mecanismo de adsorción de la especie As^{3+} y el polímero MIP. Los datos de la q_e se ajustaron al modelo cinético de pseudo segundo orden usando la ecuación (2). Las constantes del modelo cinético de pseudo-segundo orden se calcularon y son presentadas en la Tabla 1. El modelo presentó un coeficiente de correlación de $R^2 = 0.999$, mostrando que los datos experimentales se ajustaron a este modelo (Figura 3b). La constante de velocidad k_2 calculada exhibió un valor mayor a pH 4 en comparación a pH 2 y 7. El valor indica que la difusión de los iones As^{3+} es más rápida a pH 4, indicando que el proceso de la difusión del ion As^{3+} es en forma controlada.

Las propiedades de adsorción del polímero MIP se obtuvieron por las isothermas de Langmuir y Freundlich usando las ecuaciones (3) y (4), respectivamente. Los parámetros calculados por ambas isothermas se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Parámetros obtenidos por las isothermas de Langmuir, Freundlich y pseudo segundo orden de los polímeros MIP y SIP

	Langmuir			Freundlich			Pseudo segundo Orden		
	$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{b * Q_{max}} + \frac{C_e}{Q_{max}}$			$\ln q_e = \ln K_F + \frac{1}{n} \ln C_e$			$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{t}{q_e}$		
	Q_{max} (mg/g)	b (L mg ⁻¹)	R^2	$\frac{1}{n}$	K_F (mg g ⁻¹) (L mg ⁻¹)(1/n)	R^2	k_2 (g mg ⁻¹ min ⁻¹)	q_e (mg g ⁻¹)	R^2
MIP									
pH 2	48.07	1.62	0.998	1.1	0.04	0.979	48.07	1.62	0.998
pH 4	36.90	0.61	0.999	1.2	0.02	0.958	36.90	0.61	0.999
pH 7	28.32	0.35	0.997	1.3	0.01	0.915	28.32	0.35	0.997
SIP									
pH 2	13.69	0.42	0.999	1.82	0.18	0.80	13.69	0.42	0.999
pH 4	8.16	0.43	0.998	4.74	6.50	0.65	8.16	0.43	0.998
pH 7	4.06	2.11	0.999	4.07	0.88	0.75	4.06	2.11	0.999

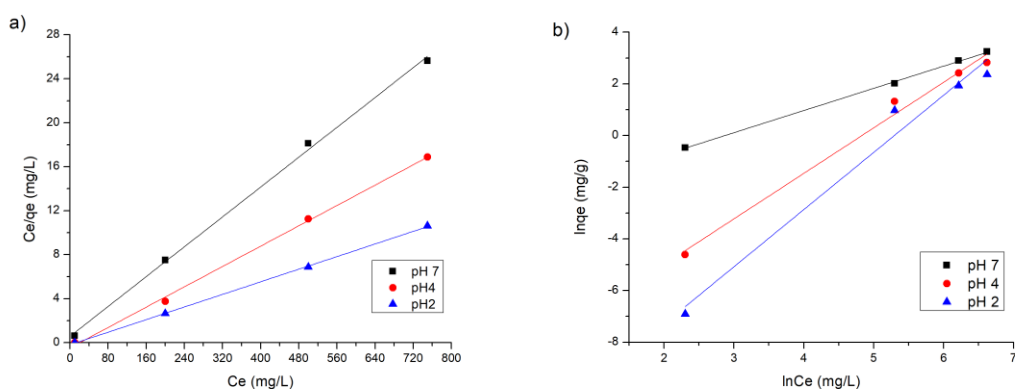


Figura 4. a) Forma lineal de la isoterma de Langmuir a diferentes valores de pH. b) Forma lineal de la isoterma de Freundlich a pH 2, 4 y 7.

En la Figura 4a, se presenta el ajuste de los datos experimentales de la forma lineal de la isoterma de Langmuir. Mostró un coeficiente de correlación $R^2= 0.99$ para pH 2, 4, y 7. A pH 2 el polímero MIP presenta la mayor capacidad de adsorción Q_{max} de 48.7 mg/g mientras el polímero SIP exhibe una Q_{max} de 13.69 mg/g. El polímero MIP a pH 4 y 7 una Q_{max} de 36.90 y 28.32 mg/g, respectivamente. La mayor capacidad de adsorción mostrada por el polímero MIP se explica por la formación del grupo piridinio de la piridina. Facilitando así la adsorción de los oxianiones $H_2AsO_3^-$. En la Figura 4b, los datos experimentales exhibieron buen ajuste a la forma

lineal de la isoterma de Freundlich, de acuerdo con el coeficiente de correlación R^2 (Tabla 1). El parámetro $1/n$ exhibió un valor de 1.1 a 1.3 a pH 2 y 7, indicando que el mecanismo de adsorción se lleva a cabo por un proceso químico, en este caso por una quimisorción, confirmando la forma iónica del grupo piridinio.

4. Conclusiones

Este estudio se mostró la selectividad del sitio activo del polímero MIP hacia el ion As^{3+} , superando significativamente la Q_{max} del polímero sin impresión molecular SIP. La isoterma Langmuir mostró la mayor adsorción del ion As^{3+} del polímero MIP a pH 2. Así mismo, la isoterma Freundlich confirmó que el mecanismo de adsorción se lleva a cabo por una quimisorción, evidenciando la formación del grupo piridinio de la piridina. La selectividad mostrada por el polímero MIP representa una ventaja significativa en la remoción directa de As^{3+} debido a que no es necesario hacer la oxidación de la especie de As^{3+} hacia la especie de As^{5+} . En un futuro se espera que este tipo de materiales contribuyan en el desarrollo tecnológico para la alta selectividad de iones As^{3+} , mediante el diseño de nuevas plantillas de impresión molecular, y hacer mejor uso de este recurso natural.

Referencias

1. M. S. Rahaman, M. M. Rahman, N. Mise, M. T. Sikder, G. Ichihara, M. K. Uddin, et al., "Environmental arsenic exposure and its contribution to human diseases, toxicity mechanism and management," *Environmental Pollution*, vol. 289, pp. 117940-117956. 2021. doi: 10.1016/j.envpol.2021.117940
2. M. M. Chaudhary, S. Hussain, C. Du, B. R. Conway, and M. U. Ghori, "Arsenic in Water: Understanding the Chemistry, Health Implications, Quantification and Removal Strategies," *Chemical Engineering*, vol. 8, no. 4, pp. 78-126. 2024. doi: 10.3390/chemengineering8040078
3. R. Zakhar, J. Derco, and F. Čacho, "An overview of main arsenic removal technologies," *Acta Chimica Slovaca*, vol. 11, no. 2, pp. 107-113. 2018. doi: 10.2478/acs-2018-0016
4. N. Ben Issa, V. N. Rajaković-Ognjanović, B. M. Jovanović, and L. V. Rajaković, "Determination of inorganic arsenic species in natural waters-Benefits of separation and preconcentration on ion exchange and hybrid resins," *Analytica Chimica Acta*, vol. 673, no. 2, pp. 185-193, 2010. doi: 10.1016/j.aca.2010.05.027
5. M. A. Barakat and S. Ismat-Shah, "Utilization of anion exchange resin Spectra/Gel for separation of arsenic from water," *Arabian Journal of Chemistry*, vol. 6, no. 3, pp. 307-311, 2013. doi: 10.1016/j.arabjc.2010.10.011
6. S. Karakurt, E. Pehlivan, and S. Karakurt, "Removal of Carcinogenic Arsenic from Drinking Water By the Application of Ion Exchange Resins," *Oncogen Journal*, vol. 2, no. 1, pp. 5-13. 2019. doi: 10.35702/onc.10005
7. H. Rahidul Hassan, "A review on different arsenic removal techniques used for decontamination of drinking water," *Environmental Pollutants and Bioavailability*, vol. 35, no. 1, pp. 1-21. 2023. doi: 10.1080/26395940.2023.2165964
8. P. Mahamallik and R. Swain, "A mini-review on arsenic remediation techniques from water and future trends," *Water Science Technology*, vol. 87, no. 12, pp. 3108-3123, 2023. doi: 10.2166/wst.2023.190

9. H. Govindappa, G. Abdi, U. T. Uthappa, G. Sriram, S. S. Han, and M. Kurkuri, "Efficient separation of arsenic species of oxyanion As (III) and As (V) by using effective polymer inclusion membranes (PIM)," *Chemosphere*, vol. 316, pp. 1-8 2023. doi: 10.1016/j.chemosphere.2023.137851
10. J. D. Akoto et al., "Polyethyleneimine stabilized nanoscale zero-valent iron-magnetite (Fe₃O₄@nZVI-PEI) for the enhanced removal of arsenic from acidic aqueous solution: Performance and mechanisms," *Journal of Environmental Chemical Engineering*, vol. 10, no. 6, pp. 1-11. 2022. doi: 10.1016/j.jece.2022.108589
11. Y. Liu, Z. Chen, X. Yin, Y. Chen, Y. Liu, and W. Yang, "Selective and efficient removal of As(V) and As(III) from water by resin-based hydrated iron oxide," *Journal of Molecular Structure*, vol. 1273, pp. 1-11 2023. doi: 10.1016/j.molstruc.2022.134361
12. G. Wulff, "Fourty years of molecular imprinting in synthetic polymers: Origin, features and perspectives," *Microchimica Acta*, vol. 180, no. 15-16. pp. 1359-1370, 2013. doi: 10.1007/s00604-013-0992-9
13. J. J. Belbruno, "Molecularly Imprinted Polymers," *Chemical Reviews*, vol. 119, no. 1, pp. 94-119, 2019. doi: 10.1021/acs.chemrev.8b00171
14. T. Velepini, K. Pillay, X. Y. Mbianda, and O. A. Arotiba, "Epichlorohydrin crosslinked carboxymethyl cellulose-ethylenediamine imprinted polymer for the selective uptake of Cr(VI)," *International Journal of Biological Macromolecules*, vol. 101, pp. 837-844, 2017. doi: 10.1016/j.ijbiomac.2017.03.048
15. M. Monier and N. H. Elsayed, "Selective extraction of uranyl ions using ion-imprinted chelating microspheres," *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 423, pp. 113-122, 2014. doi: 10.1016/j.jcis.2014.02.015
16. J. S. Mankar, M. D. Sharma, and R. J. Krupadam, "Molecularly imprinted nanoparticles (nanoMIPs): an efficient new adsorbent for removal of arsenic from water," *Journal of Materials Science*, vol. 55, no. 16, pp. 6810-6825, 2020. doi: 10.1007/s10853-020-04377-0
17. M. S. Jagirani et. al. "Preparation of novel arsenic-imprinted polymer for the selective extraction and enhanced adsorption of toxic As³⁺ ions from the aqueous environment," *Polymer Bulletin*, vol. 77, no. 10, pp. 5261-5279, 2020. doi: 10.1007/s00289-019-03008-2
18. H. B. Ahmad, G. E. Yasmin, S. A. Arain, I. A. Bhatti, and M. Hussain, "Synthesis of some novel adsorbents for antimicrobial activity and removal of arsenic from drinking water," *Korean Journal of Chemical Engineering*, vol. 32, no. 4, pp. 661-666, 2015. doi: 10.1007/s11814-014-0269-y
19. Abdullah et. al. "Ultrasonic mediated synthesis of arsenic imprinted polymer and their analytical practicality as a selective sorbent for removal of toxic As³⁺ ion from real samples," *Journal of Polymer Research*, vol. 27, no. 9, pp. 28-30, 2020. doi: 10.1007/s10965-020-02196-0

Descubrimiento de exoplanetas mediante aprendizaje automático

Sandro Garcia-Palomino¹, Gustavo Rodriguez-Gomez¹

¹Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Computer Science Department, Santa María Tonantzintla, Puebla 72840, Mexico

Resumen: La detección de exoplanetas se ha convertido en un desafío esencial para la astrofísica contemporánea. Métodos tradicionales como el tránsito o la velocidad radial han permitido grandes avances, pero presentan limitaciones frente al ruido, la complejidad de los datos y la necesidad de análisis manual. En este artículo se presenta una revisión crítica de los enfoques actuales basados en aprendizaje automático, destacando el papel de arquitecturas como las redes convolucionales, los modelos basados en Transformer y las técnicas generativas. Se analizan sus aplicaciones en curvas de luz, espectros e imágenes astronómicas, así como sus ventajas y limitaciones. Además, se identifican brechas en la literatura, como la falta de interpretabilidad, la escasa generalización entre misiones y la subutilización de datos multimodales. Finalmente, se plantea el desarrollo de un modelo multimodal de aprendizaje profundo como propuesta para integrar distintas fuentes de datos astronómicos en un sistema único, robusto y escalable. Esta visión busca avanzar hacia una detección de exoplanetas más precisa, automatizada y científicamente confiable.

1. Introducción

La búsqueda de exoplanetas —planetas ubicados fuera del sistema solar— representa una de las líneas actuales de investigación más activas en la astrofísica moderna. La posibilidad de identificar mundos similares a la Tierra impulsa no solo el conocimiento científico, sino también el desarrollo de nuevas tecnologías. Misiones como *Kepler* y *TESS* han permitido la recolección de millones de curvas de luz con el objetivo de detectar estos cuerpos celestes mediante el método de tránsito, que identifica pequeñas caídas periódicas en el brillo de una estrella debido al paso de un planeta frente a ella [1-2].

No obstante, este método presenta importantes desafíos: los datos contienen ruido, eventos astrofísicos pueden imitar tránsitos, y el análisis manual de los eventos detectados es lento y propenso a errores [1,3]. Para resolver estas dificultades, se han propuesto enfoques automáticos basados en aprendizaje automático (ML, por sus siglas en inglés) y aprendizaje profundo (DL), como redes neuronales convolucionales (CNN) [1], algoritmos tradicionales como el *gradient boosting* [2] y visión por computadora aplicada a espectros estelares [4].

Recientemente, se ha introducido el uso de arquitecturas tipo *Transformer*, capaces de capturar relaciones temporales en secuencias sin la necesidad de apilar múltiples capas, lo que mejora la eficiencia y ayuda a la interpretabilidad gracias a

Volumen 1, no. 2

Recibido: julio 11, 2025

Aceptado: agosto 29, 2025

autor de correspondencia:
grodri@inaoep.mx

© 2025 Revista Ciencia
Aplicada

los mapas de atención [1]. Por otro lado, también se ha explorado el uso de modelos simples como la regresión logística aplicada a imágenes astronómicas, lo cual ha mostrado mejoras notables en la detección de planetas poco brillantes sin incrementar la tasa de falsos positivos [5].

Una de las principales limitaciones ha sido la falta de generalización y la dependencia de representaciones específicas, como el “folding” de curvas de luz y la escasa integración de datos multimodales como imágenes, espectros y series temporales [2-3]. En este sentido, el desarrollo de bases de datos estandarizadas como *The Multimodal Universe* [6] abre la posibilidad de trabajar con datos de diferentes modalidades en un mismo entorno, lo que facilita el entrenamiento de modelos más robustos y generalizables.

Este trabajo plantea una revisión general de los enfoques actuales en la detección de exoplanetas mediante aprendizaje automático, identifica las brechas persistentes en la literatura, y argumenta cómo nuevas estrategias basadas en modelos interpretables pueden ofrecer una mejora sustancial en la localización y clasificación automática de exoplanetas.

2. Métodos de detección de exoplanetas

La detección de exoplanetas se basa en métodos tanto directos como indirectos, cada uno con ventajas y limitaciones propias. Los métodos indirectos, como el tránsito y la velocidad radial (*radial velocity*, RV), han sido responsables de la mayoría de los descubrimientos confirmados hasta la fecha [1]. Por otro lado, métodos directos, como la imagen de alto contraste, permiten caracterizar propiedades físicas de los planetas, aunque son técnicamente más exigentes.

2.1 Método de tránsito

El método de tránsito se basa en detectar pequeñas disminuciones periódicas en el brillo de una estrella cuando un planeta pasa frente a ella desde nuestra perspectiva. La Figura 1 muestra un ejemplo de esta técnica, presentando la curva de luz observada para la estrella KIC 6922244, donde se aprecian caídas de flujo que sugieren posibles tránsitos planetarios. (esta investigación hizo uso de *Lightkurve*, una librería de Python para análisis de datos de *Kepler* y *TESS Lightkurve Collaboration*, 2018). Esta caída de flujo es proporcional al área del planeta respecto al área de la estrella [1]. Para facilitar el análisis y destacar las señales débiles, el flujo se somete a un proceso de normalización. Una vez normalizada, como se observa en la Figura 2 para la misma estrella, KIC 6922244, los tránsitos se distinguen con mayor claridad de las variaciones estelares de fondo. La técnica requiere fotometría de alta precisión y un alineamiento orbital favorable. Su principal ventaja es que permite estimar el radio del planeta y, si se combina con velocidad radial, su densidad.

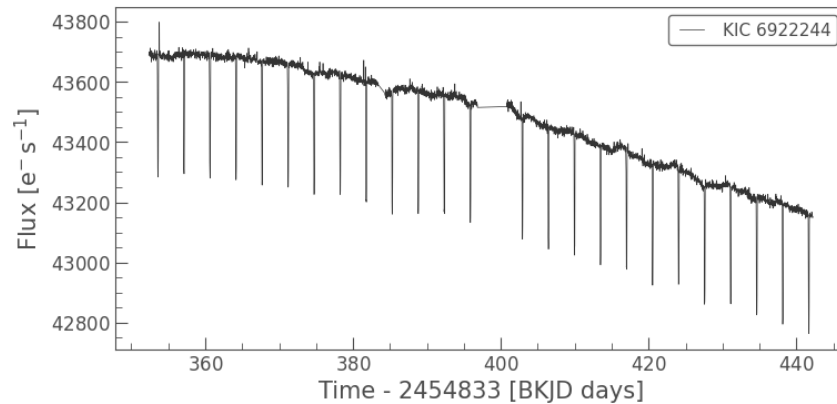


Figura 1. Curva de luz observada para la estrella KIC 6922244 sin normalización. Se aprecian caídas de flujo periódicas que podrían corresponder a tránsitos planetarios.

Este método ha sido potenciado por el uso de inteligencia artificial. Malik et al. [2] aplicaron el algoritmo LightGBM sobre curvas de luz procesadas con TSFRESH, logrando métricas comparables a las de redes profundas con menor costo computacional. Prasad et al. [3], por su parte, utilizaron el algoritmo *Box Least Squares* (BLS) como paso previo a la clasificación de curvas de luz mediante redes neuronales.

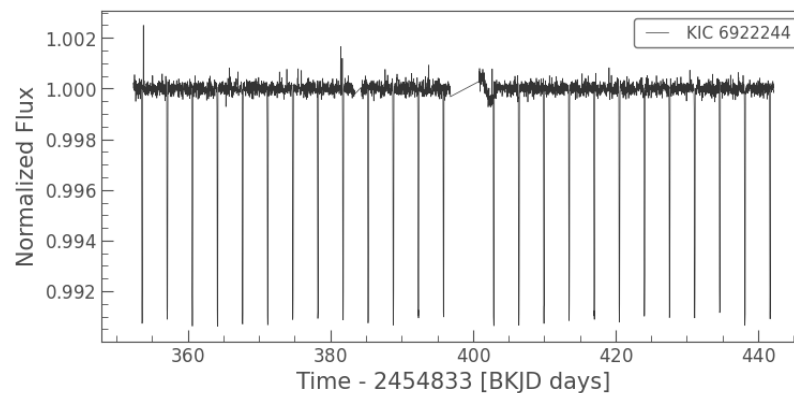


Figura 2. Curva de luz normalizada de la estrella KIC 6922244, donde se destacan con mayor claridad los posibles tránsitos.

2.2 Velocidad radial

El método Velocidad Radial (RV) mide el desplazamiento Doppler de las líneas espectrales de una estrella inducido por el tirón gravitacional de un planeta orbitante [1]. Es particularmente efectivo para detectar planetas masivos cercanos a la estrella y no depende del alineamiento orbital como el tránsito.

Mignon et al. [4] realizaron un análisis homogéneo de 200 enanas M usando el espectrógrafo HARPS, confirmando su sensibilidad para detectar planetas de baja masa en zonas habitables. En paralelo, Gan y Rajpaul [5] propusieron un enfoque

novedoso basado en visión por computadora para extraer señales de RV directamente de espectros, evitando la dependencia del método clásico de correlación cruzada. Este método logró resultados comparables a los estándares de la industria en menor tiempo de cómputo.

2.3 Imagen directa (Direct Imaging)

La imagen directa busca observar al planeta separando su débil luz de la brillante emisión estelar. Este método es fundamental para caracterizar atmósferas y órbitas, pero presenta grandes retos debido al contraste extremo de brillo entre la estrella y el planeta [1]. Se requieren técnicas ópticas avanzadas como óptica adaptativa, así como procesamiento intensivo de imágenes.

Daglayan et al. [6] propusieron el algoritmo *AMAT*, que mejora las técnicas clásicas de sustracción de la función de dispersión puntual (*PSF*) utilizando un enfoque iterativo basado en minimización L1/L2 y modelos de baja complejidad. En la misma línea, Cambazard et al. [7] aplicaron regresión logística sobre imágenes preprocesadas, logrando una detección más eficiente de señales planetarias débiles sin aumentar los falsos positivos. Flasseur et al. [8] integraron datos multispectrales con *CNN*, superando algoritmos clásicos al aprovechar la diversidad espectral y espacial de los datos.

2.4 Enfoques complementarios y emergentes

El uso de datos sintéticos generados por redes generativas representa una innovación relevante. El estudio *AstroFusion* de Suresh et al. [9] mostró que modelos entrenados con datos sintéticos alcanzan precisión comparable a modelos entrenados con datos reales. Al combinar ambos conjuntos, se logró mejorar la tasa de aciertos en hasta un 96 % para *Random Forests*.

Finalmente, Angeloudi et al. [10] propusieron *The Multimodal Universe*, un conjunto de datos de más de 100 TB que integra imágenes, espectros y series temporales en un formato estandarizado y escalable para aprendizaje automático. Esta iniciativa permite trabajar con datos heterogéneos de múltiples observatorios y es clave para el desarrollo de modelos más robustos y generalizables.

3. Descubrimiento de exoplanetas con aprendizaje automático

El uso de aprendizaje automático ha dado lugar a avances significativos en la detección de exoplanetas, especialmente al abordar las limitaciones de los métodos tradicionales. A continuación, se presentan algunos de los enfoques más relevantes y representativos.

3.1 Modelo PANOPTICON: detección sin filtrado previo

PANOPTICON, una arquitectura basada en U-Net, permite detectar tránsitos planetarios únicos en curvas de luz sin necesidad de filtrado previo [7]. Entrenado

con datos simulados de la misión PLATO, el modelo alcanzó una tasa de acierto del 90 % incluso en señales de bajo contraste, demostrando una notable capacidad para reconocer eventos difíciles de identificar con métodos clásicos.

3.2 MAC-Net: clasificación multimodal de objetos celestes

MAC-Net es una red neuronal que combina espectros bidimensionales e imágenes del SDSS para clasificar estrellas, galaxias y cuásares [8]. Esta integración de entradas multimodales permitió alcanzar una precisión del 98.6 %, superando enfoques basados exclusivamente en espectros unidimensionales.

3.3 Modelos con GANs: generación de datos sintéticos

AstroFusion aplica redes generativas adversarias (GANs) para crear datos sintéticos de tránsitos, lo que permite entrenar modelos con más variabilidad y robustez [9]. Al mezclar datos simulados y reales, se logró aumentar la precisión de modelos como Random Forest sin comprometer la confiabilidad de las detecciones.

3.4 Transformers para señales de tránsito

El uso de modelos Transformer ha demostrado gran potencial para la clasificación de curvas de luz, permitiendo distinguir entre eventos reales y falsos positivos sin necesidad de preprocesamiento complejo ni extracción manual de características [1].

3.5 LightGBM con extracción automática de características

Una alternativa más eficiente al uso de redes profundas es el enfoque propuesto por Malik et al., que aplica LightGBM sobre características generadas automáticamente mediante TSFRESH [2]. Esta estrategia ofrece resultados competitivos con un menor costo computacional y una mayor interpretabilidad.

4. Ventajas y limitaciones de los enfoques actuales

El aprendizaje automático ha demostrado ser una herramienta poderosa en la detección de exoplanetas, ofreciendo avances significativos en eficiencia, precisión y adaptabilidad. La Figura 3, por ejemplo, ilustra el rendimiento de un modelo típico, mostrando la precisión alcanzada en los conjuntos de entrenamiento y validación. En el contexto de las redes neuronales, el eje X de esta figura representa la época, que es un recorrido completo del conjunto de datos de entrenamiento a través del algoritmo de aprendizaje. No obstante, estos modelos también presentan limitaciones técnicas y científicas que es importante considerar.

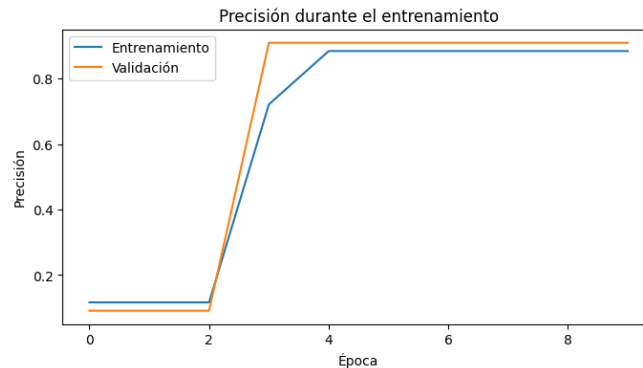


Figura 3. Precisión en el conjunto de entrenamiento y validación durante el entrenamiento del modelo. Se observa una rápida convergencia tras la tercera época.

4.1 Ventajas principales

Las principales ventajas de la aplicación de los enfoques de aprendizaje automático en la detección de exoplanetas radican en su capacidad para manejar la complejidad y el volumen de los datos astronómicos. Estos beneficios se manifiestan en la mejora de la velocidad de procesamiento, la sensibilidad de detección y la robustez del análisis, superando varias de las limitaciones inherentes a los métodos tradicionales detallados a continuación:

- Escalabilidad y velocidad de inferencia. Modelos como PANOPTICON pueden analizar curvas de luz completas en menos de 0.2 segundos, lo que permite procesar grandes volúmenes de datos de manera eficiente [7].
- Detección de señales débiles y eventos únicos. A diferencia de métodos clásicos que dependen de periodicidad o filtrado previo, PANOPTICON permite detectar tránsitos únicos, incluyendo aquellos largos o poco profundos, con alta sensibilidad y baja tasa de falsos positivos [7].
- Fusión de datos multimodales. Redes como MAC-Net combinan espectros bidimensionales e imágenes para mejorar la clasificación de objetos, superando enfoques tradicionales basados en entradas unidimensionales [8].
- Robustez frente al ruido. Gracias a arquitecturas como U-Net, los modelos actuales pueden extraer características en presencia de ruido estelar, rayos cósmicos y variaciones de fondo [7].
- Uso de datos sintéticos. El modelo AstroFusion demostró que la generación de datos sintéticos con GANs puede complementar eficazmente los conjuntos de datos reales, mejorando la tasa de aciertos sin comprometer la precisión [9].

4.2 Limitaciones y desafíos actuales

A pesar de los avances que ofrece el aprendizaje automático en la astrofísica, su aplicación práctica se enfrenta a importantes obstáculos. Las limitaciones actuales se centran principalmente en aspectos como la fiabilidad, la dependencia de los

datos, la robustez entre diferentes fuentes de información y la accesibilidad, planteando desafíos que la investigación en el área debe superar:

- Falta de interpretabilidad. Muchos modelos de redes profundas funcionan como cajas negras, lo que dificulta su validación científica.
- Dependencia de datos bien etiquetados. Modelos como los basados en CNN o LightGBM requieren conjuntos de datos etiquetados, balanceados y representativos [2].
- Sensibilidad a la calidad de entrada. Aunque MAC-Net y otros modelos multimodales han demostrado rendimiento alto, su precisión depende en gran medida de la calidad y homogeneidad de los datos de entrada [8].
- Generalización entre misiones. Modelos entrenados con datos de misiones específicas como TESS, LAMOST o PLATO pueden no generalizar bien a otros instrumentos sin reentrenamiento, debido a diferencias en resolución, ruido o formato [1].
- Costo computacional en entrenamiento. Aunque la inferencia es rápida, el entrenamiento de estos modelos profundos requiere recursos computacionales significativos y tiempos prolongados, como se observó en PANOPTICON [7].

5. Oportunidades y desafíos futuros

El uso de aprendizaje automático para la detección de exoplanetas aún se encuentra en expansión, con múltiples áreas en desarrollo que ofrecen oportunidades concretas para mejorar los métodos actuales, pero también plantean desafíos técnicos y metodológicos como los que a continuación se mencionan.

5.1 Aprovechamiento de datos multimodales

La astronomía moderna genera datos en múltiples formatos: curvas de luz, espectros, imágenes multibanda y catálogos. Iniciativas como The Multimodal Universe están abriendo el camino hacia modelos capaces de aprender simultáneamente de distintas fuentes, integrando patrones temporales, espectrales y espaciales [6]. El reto está en diseñar arquitecturas que aprovechen esta diversidad sin volverse inestables ni excesivamente costosas. Modelos multimodales también deben resolver cómo sincronizar diferentes resoluciones temporales y espaciales sin perder información crítica [10].

5.2 Estándares para entrenamiento y validación

Aún no existe un consenso sobre benchmarks estándar ni sobre la forma óptima de validar modelos de detección de exoplanetas. Muchos trabajos usan datasets simulados o propios, lo que dificulta la comparación directa entre enfoques. La creación de bases de datos públicas, bien etiquetadas y representativas es crucial para establecer una base común que permita evaluar avances de forma transparente y reproducible. En este contexto, algunos estudios proponen combinar datos reales

con datos sintéticos generados por GANs o simuladores físicos para aumentar la robustez de los modelos y mejorar su capacidad de generalización [12].

5.3 Interpretabilidad y confianza en los resultados

Uno de los principales obstáculos para una adopción más amplia en la comunidad científica es la falta de interpretabilidad. Modelos complejos como *Transformers* o *GANs* pueden ofrecer alta precisión, pero sus decisiones no siempre son comprensibles para los astrónomos. Se requieren herramientas de interpretación y visualización que permitan entender cómo el modelo llegó a una conclusión, especialmente en detecciones sin precedentes. Propuestas recientes sugieren el uso de explicabilidad post-hoc mediante técnicas como LIME o SHAP para apoyar la interpretación de las decisiones del modelo [10].

5.4 Transferencia entre misiones e instrumentos

La capacidad de adaptar modelos a nuevos instrumentos (como el telescopio *James Webb*, TESS, o futuras misiones como ARIEL) es esencial. Hoy, muchos modelos tienen que ser reentrenados desde cero con los datos de cada misión, lo cual es ineficiente. Una oportunidad está en aplicar técnicas de *transfer learning* o entrenamiento contrastivo para facilitar la reutilización de modelos previamente entrenados. Además, se ha señalado que la calibración de modelos en dominios con distintas características estadísticas, por ejemplo en señales espectroscópicas multivariadas, puede beneficiarse del uso de reducción de dimensionalidad antes de aplicar técnicas de detección de anomalías [11].

6. Conclusiones

El aprendizaje automático ha demostrado ser una herramienta útil y cada vez más robusta para enfrentar los retos en la detección de exoplanetas, desde la clasificación de tránsitos hasta el análisis de señales espectrales e imágenes multibanda. Modelos como PANOPTICON, MAC-Net o AstroFusion evidencian que es posible aumentar la sensibilidad y precisión al integrar arquitecturas modernas y estrategias de fusión de datos.

En este contexto, la presente investigación se vincula directamente con estas tendencias, al centrarse en el diseño y la validación de un modelo multimodal de aprendizaje profundo para la detección de exoplanetas. Este enfoque busca integrar múltiples fuentes de datos astronómicos en una sola arquitectura, maximizando la capacidad de detección y reduciendo los falsos positivos. Con ello, se espera contribuir a un campo que evoluciona rápidamente, pero que aún requiere soluciones más generales, interpretables y adaptables a nuevas misiones espaciales.

Referencias

1. H. Salinas, K. Pichara, R. Brahm, et al., "Distinguishing a planetary transit from false positives: a Transformer-based classification for planetary transit signals," *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 522, pp. 3201–3216, 2023. <https://doi.org/10.1093/mnras/stad1173>
2. A. Malik, B. P. Moster, and C. Obermeier, "Exoplanet detection using machine learning," *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 513, pp. 5505–5516, 2022. <https://doi.org/10.1093/mnras/stab3692>
3. M. S. Prasad, S. Verma, and Y. A. Shichkina, "Astronomical image processing: Exoplanet detection," *IEEE International Conference on Soft Computing and Measurements (SCM)*, St. Petersburg, Russia, 2023, pp. 336–339. <https://doi.org/10.1109/SCM58628.2023.10159069>
4. K. Gan and V. M. Rajpaul, "A computer vision approach to radial velocity extraction for exoplanet detection," *IEEE Undergraduate Research Technology Conference (URTC)*, Cambridge, MA, USA, 2023, pp. 1–5. <https://doi.org/10.1109/URTC60662.2023.10534937>
5. H. Cambazard, N. Catusse, A. Chomez, et al., Lagrange, "Logistic regression to boost exoplanet detection performances," *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 536, no. 2, pp. 1610–1624, 2025. <https://doi.org/10.1093/mnras/stae2657>
6. E. Angeloudi, J. Audenaert, M. Bowles, et al., "The Multimodal Universe: Enabling Large-Scale Machine Learning with 100 TB of Astronomical Scientific Data," *NeurIPS 2024 Datasets and Benchmarks Track*, 2024. *arXiv preprint arXiv:2412.02527*.
7. H. G. Vivien, L. Garcia, F. Xavier, et al., "PANOPTICON: detection of single transit events in PLATO light curves," *Astronomy & Astrophysics*, vol. 685, pp. A32, 2025. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202452124>
8. M. Zhang, J. Wu, Z. Zhang y Z. Liu, "MAC-Net: A multimodal celestial object classification network based on 2D spectrum," *Research Notes of the AAS: RASTAI*, vol. 7, no. 4, pp. 120–128, 2023. <https://doi.org/10.1093/rasti/rzad026>
9. A. Suresh, L. C. G. PV, et al., "AstroFusion: A GAN-Augmented Approach for Exoplanet Detection," *2024 International Conference on Emerging Techniques in Computational Intelligence (ICETCI)*, Hyderabad, India, 2024, pp. 330–337, doi: 10.1109/ICETCI62771.2024.10704142
10. U. A. Usmani, I. Abdul Aziz, J. Jaafar, et al., "Deep Learning for Anomaly Detection in Time-Series Data: An Analysis of Techniques, Review of Applications, and Guidelines for Future Research," in *IEEE Access*, vol. 12, pp. 174564–174590, 2024, doi: 10.1109/ACCESS.2024.3495819
11. Altin, M., and Cakir, A. (2024). Exploring the influence of dimensionality reduction on anomaly detection performance in multivariate time series. *IEEE Access*, 12, 85783–85794
12. Cuéllar S, Granados P, Fabregas E, et al. (2022) Deep learning exoplanets detection by combining real and synthetic data. *PLOS ONE* 17(5): e0268199. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0268199>

Modelación matemática del calor en un sólido cúbico

Omar Aguilar-Loreto

Departamento de Ingenierías, Universidad de Guadalajara CUCSUR, 48902, Autlán de Navarro, Jalisco, México.

Resumen: El estudio del calor y de su propagación en distintos medios ha sido de interés para la comunidad científica desde hace varios siglos. En este trabajo se presenta, de manera clara y concisa, un esquema general para la modelación analítica de la propagación del calor. En particular, se analiza la distribución de temperaturas en un sólido cúbico aislado sometido a una fuente de calor constante en estado estacionario, desarrollando los modelos correspondientes bajo las condiciones iniciales y de frontera más comunes. Para el caso del sólido aislado se consideran dos escenarios representativos de distribuciones iniciales de temperatura y se estudia su evolución temporal.

1. Introducción

El estudio del calor y otras magnitudes físicas ha traído como consecuencia, el desarrollo de un marco científico y eficaz por medio del cual se pueda reproducir algunos fenómenos físicos en forma controlada. La mayoría de las veces no es posible estudiarlo de manera directa, ya que depende de varios factores sobre los cuales no se puede tener control, y que en ocasiones quedan fuera del alcance del experimentador [1]. Tales factores pueden ser de índole económica, involucrar materiales aún no explorados, requerir condiciones ideales que no se presentan cotidianamente, o implicar la falta de muestras específicas, entre otros. Por estas razones, el científico se ve obligado a reproducir los fenómenos bajo condiciones restringidas. Con el desarrollo de la tecnología, hoy en día existen diversos recursos para lograrlo, como computadoras y software especializado [2,3].

En situaciones como las anteriormente descritas, es preciso y necesario recurrir al concepto de modelación [1], [4,5]. La modelación permite reproducir un fenómeno físico que no puede ser estudiado de forma directa. Desde luego, siempre representa una aproximación a la situación real. No obstante, aunque el modelo está sustentado en lógica matemática y sea consistente con los modelos aceptados hasta la fecha, la experimentación sigue siendo el criterio que determina su validez [6-8]. Ejemplos notables de este esquema en particular en la Física [9] incluyen la predicción de la antimateria a partir de las ecuaciones de Dirac [10], las ondas gravitacionales [11] o el bosón de Higgs [12].

En este contexto, en el presente trabajo se propone el modelo para el estudio del calor, que hoy en día es un esquema bien conocido pero no con la suficiente transparencia y con la concisión en la deducción de sus principios fundamentales y que sea claro de abordar.

Volumen 1, no. 2

Recibido: octubre 23, 2025

Aceptado: sept. 17, 2025

autor de correspondencia:
omar.aguilar@academicos.
udg.mx

© 2025 Revista Ciencia
Aplicada

Este marco teórico permite ofrecer un primer acercamiento al estudio de diversos materiales que brindan una oportunidad idónea para analizar fenómenos físicos complejos bajo condiciones delimitadas, considerando al calor como una de sus características sobresalientes. La mayoría de materiales se consideran como un sistema multiparamétrico en el que intervienen procesos térmicos y mecánicos, susceptibles de ser modelados mediante métodos matemáticos y computacionales [13]. Por ejemplo, el material mortero es utilizado, tanto en aplicaciones estructurales como no estructurales, junto con su disponibilidad y bajo costo, lo convierten en un candidato viable para simular y analizar la evolución del calor [14]. Esto permite explorar fenómenos asociados al comportamiento de materiales cementantes, además de que constituye un medio práctico y representativo para validar modelos físicos aplicables a sistemas más complejos.

La novedad de este trabajo radica en la claridad de la exposición del método analítico comúnmente utilizado en todos los ámbitos científicos para modelar el calor, utilizando las herramientas de las ecuaciones diferenciales parciales en todo el proceso, desde la deducción—donde se desarrolla explícitamente todo el proceso para llegar a la ecuación del calor—, hasta la exposición de dicho método con ejemplos claros que describen situaciones físicas de interés en varios ámbitos del modelado científico. Hasta donde tenemos conocimiento, el abordar el modelado matemático para 3+1 dimensiones no se ha presentado en forma extensa y explícita anteriormente.

En la siguiente sección se da un panorama físico para reconocer las cantidades fundamentales, que intervienen en la caracterización del modelo del calor así como su definición. En el apartado 3 se establece el principio universal de la conservación de la energía como el pilar esencial en la deducción del modelo. En la sección 4 se establecen las bases para deducir minuciosamente la ecuación del calor con la suficiente consistencia, se describe la situación desde el punto de vista tridimensional más general. Los resultados principales, a manera de consecuencia y ejemplos del modelo desarrollado en la sección anterior de este artículo, se exponen en la sección 5. Finalmente en la sección 6 se describen las conclusiones así como las ideas que se abordarán en un artículo posterior.

2. Variables Macroscópicas

La Capacidad Calorífica (C) es una medida de la resistencia de un cuerpo para incrementar su temperatura al suministrar calor al mismo, sin embargo, cabe distinguir entre lo que es temperatura y calor. El calor es una medida de la energía térmica, mientras que la temperatura corresponde a la medida macroscópica de un cuerpo de la cantidad de energía térmica acumulada en el cuerpo. En virtud de esto podemos definir, la capacidad calorífica como

$$C = \frac{e}{u} \quad (1)$$

donde e corresponde a la cantidad de energía térmica en Joules y u representa la temperatura en Kelvin en el Sistema Internacional de Unidades (SI). De la misma forma, la capacidad calorífica está relacionada con la cantidad de masa a la cual se le suministra calor. De aquí, surge el concepto de calor específico, que es la capacidad calorífica por unidad de masa m (en kg), $c = C/m$ el concepto de calor específico depende en gran medida de la distribución de masa en un material por lo que puede ser modelado con una función escalar que dependa de la posición del volumen que ocupa el objeto, $c(\vec{x})$ con $\vec{x} = (x, y, z)$ en coordenadas cartesianas. El calor específico depende también de la densidad de masa (ρ) del material esto es, la cantidad de masa almacenada en ese mismo volumen (m^3), se define como $\rho = m/V$ donde m es la distribución de masa en el volumen (V) a considerar [15].

Asimismo, el objeto puede tener una distribución de masa no uniforme por lo que la densidad se puede modelar con una función escalar $m(\vec{x})$, si expresamos la masa de un cuerpo en términos de su densidad de masa se tiene $m(\vec{x}) = \rho(\vec{x})V$. De lo anterior podemos deducir que la capacidad calorífica se puede expresar como

$$C(\vec{x}) = c(\vec{x})\rho(\vec{x})V. \quad (2)$$

3. Conservación de la Energía

La dinámica de la energía térmica dentro del objeto de interés se puede conseguir al estudiar la cantidad de calor que existe dentro del cuerpo y sus aportaciones internas como externas, para ello es necesario preservar el principio universal de la conservación de la energía durante un proceso evolutivo [15], [16]. De esta manera podemos enunciar la conservación de la energía para un sólido arbitrario en la forma que sigue

$$\begin{aligned} \text{cambios en la cantidad de calor} &= \text{flujo de calor interno o externo} \\ &+ \text{fuentes de calor} \end{aligned}$$

los cambios que surjan en la cantidad de energía térmica en el objeto de estudio, son expresados por medio de $\partial e/\partial t$, que es la derivada parcial con respecto al tiempo t (en seg.). El flujo de calor existente que penetra o escapa en el cuerpo a través de una determinada sección transversal de superficie finita se modela por medio de una función que depende de las coordenadas espaciales $\vec{x} = (x, y, z)$ y el tiempo (t) que usualmente se denota por $\varphi(\vec{x}, t)$ y está dada en unidades de cantidad de calor sobre unidad de tiempo sobre unidad de superficie (J/sm^2 en el SI). En último término pueden existir aportaciones internas de calor posiblemente por reacciones químicas o nucleares o de otra naturaleza, al interior del objeto, que se pueden modelar por medio de una función $Q(\vec{x}, t)$ (J/sm^2 en el SI).

Al formular lo anterior en términos matemáticos se obtiene lo siguiente

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \varphi(\vec{x}, t) + Q(\vec{x}, t). \quad (3)$$

4. Objeto Tridimensional

En el caso de objetos tridimensionales comenzaremos con un sólido arbitrario y la evolución de la distribución del calor en el mismo. En el caso de un objeto arbitrario que ocupa un volumen V , se deben sumar todas las contribuciones a la cantidad de energía térmica total del objeto, esto se ve reflejado en la ecuación (4) al adquirir la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\iiint_{\text{Volumen}} c(\vec{x})\rho(\vec{x})u(\vec{x}, t)dV \right) = - \oiint_{\text{Area}} \vec{\varphi}(\vec{x}, t) \cdot d\vec{S} + \iiint_{\text{Volumen}} Q(\vec{x}, t)dV. \quad (4)$$

Se observa que la función $u(\vec{x}, t)$ describe la distribución de temperatura como una magnitud física, macroscópicamente medible. El primer término del segundo miembro de la ecuación, se interpreta como el flujo de calor que ocurre a través de una sección transversal muy pequeña de área denotada por $d\vec{S}$. La función $\vec{\varphi}(\vec{x}, t)$ denominado vector de flujo calórico, ahora adquiere un carácter vectorial al extender el caso a tres dimensiones, por lo que es necesario hacer la proyección de este vector sobre el vector perpendicular (normal) a la superficie del volumen que ocupa el sólido, notemos que si el volumen es finito, la superficie es cerrada de ahí la notación en la integral [15]. También es importante notar que la normal apunta hacia el exterior del volumen, de esta manera los cambios de flujo en el interior del volumen se consideran con signo negativo. Por último, el segundo término del segundo miembro de la ecuación (4) representa el rastreo de las posibles fuentes de calor al interior del objeto.

El primer término del segundo miembro de la ecuación (4) se puede modificar haciendo uso del teorema de la divergencia de Gauss [16]

$$\oiint_{\text{Area}} \vec{A}(\vec{x}, t) \cdot d\vec{S} = \iiint_{\text{Volumen}} \vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t)dV. \quad (5)$$

Siempre y cuando el cuerpo que ocupa el material sea globalmente homogéneo y la hipótesis de que la función vectorial $\vec{A}(\vec{x}, t)$ sea una función continua y diferenciable en el volumen que ocupa el sólido. La ecuación (4) adquiere la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\iiint_{\text{volumen}} c(\vec{x})\rho(\vec{x})u(\vec{x}, t)dV \right) = - \iiint_{\text{volumen}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\varphi}(\vec{x}, t)dV + \iiint_{\text{volumen}} Q(\vec{x}, t)dV. \quad (6)$$

Si una integral definida en un volumen arbitrario es cero, entonces su integrando es nulo, de donde se deduce la expresión

$$c(\vec{x})\rho(\vec{x}) \frac{\partial u(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{\varphi}(\vec{x}, t) + Q(\vec{x}, t) \quad (7)$$

que es la Ecuación del Calor (o Difusión).

4.1. Ley del Flujo del Calor de Fourier

Hacia 1822 Joseph Fourier postula el principio por el cual se conduce el calor a través de objetos metálicos bidimensionales [17], el cual es proporcional al negativo del gradiente de temperatura

$$\vec{\varphi}(\vec{x}, t) = -K_0(\vec{x})\vec{\nabla}u(\vec{x}, t) \quad (8)$$

donde el término $K_0(\vec{x})$ se conoce como conductividad térmica y puede depender del material.

Finalmente, al sustituir en la ecuación (8) se obtiene

$$c(\vec{x})\rho(\vec{x}) \frac{\partial u(\vec{x}, t)}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (K_0(\vec{x})\vec{\nabla}u(\vec{x}, t)) + Q(\vec{x}, t) \quad (9)$$

esta es la ecuación del calor en su forma más general.

En este desarrollo, podemos considerar que el material es homogéneo y uniforme además de isótropo por lo que la densidad de masa, el calor específico y la conductividad del mismo son constantes. También hemos supuesto que no existen fuentes de calor al interior del cuerpo, es decir, $Q(\vec{x}, t) = 0$ de esta forma la ecuación del calor se expresa como

$$\frac{\partial u(\vec{x}, t)}{\partial t} = k\nabla^2 u(\vec{x}, t). \quad (10)$$

donde $k = K_0/c\rho$ es la Difusividad Térmica del material [15, 18].

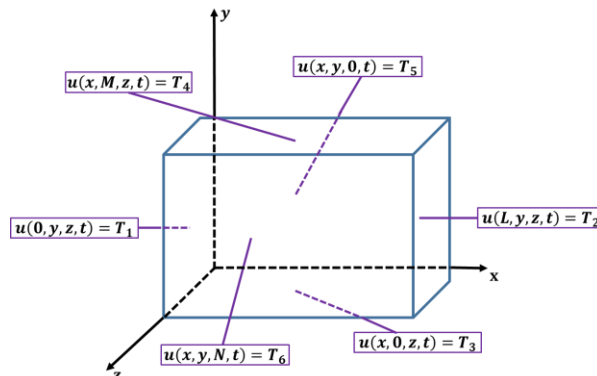


Figura 1: Un sólido rectangular ideal con las 6 caras sometidas a distintas temperaturas en el esquema general.

Al usar los métodos de la Física-matemática se puede encontrar la solución a la ecuación (10) [15,16],[18] donde hemos considerado un prisma rectangular con dimensiones $L \times M \times N$ es decir el volumen esta delimitado en la forma $V = \{\vec{x} \in \mathbb{R} / 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq M, 0 \leq z \leq N\}$, observe la figura 1, de esta manera se tiene

$$u(x, y, z, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} A_{lmn} \sin\left(\frac{l\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{M}\right) \sin\left(\frac{n\pi z}{N}\right) \times e^{-\left(\frac{(l\pi)^2}{L^2} + \frac{(m\pi)^2}{M^2} + \frac{(n\pi)^2}{N^2}\right)at} \quad (11)$$

En esta solución hemos considerado que todas las caras del rectángulo están aisladas, en la figura 1 basta tomar $T_1 = T_2 = \dots = T_6 = 0$, es decir,

$$\begin{aligned} u(0, y, z, t) &= 0 & u(L, y, z, t) &= 0 \\ u(x, 0, z, t) &= 0 & u(x, M, z, t) &= 0 \\ u(x, y, 0, t) &= 0 & u(x, y, N, t) &= 0 \end{aligned} \quad (12)$$

Asimismo, se ha supuesto que inicialmente se tiene una distribución de temperatura específica

$$u(x, y, z, t = 0) = f(x, y, z) \quad (13)$$

4.2. Caras de un prisma a temperatura constante

Las caras de un prisma no necesariamente deben ser aisladas, en este caso se pueden mantener a una temperatura fija por lo que la solución a la ecuación del calor se modifica ligeramente, en las condiciones de frontera

$$\begin{aligned}u(0, y, z, t) = T_1 & \quad u(L, y, z, t) = T_2 \\u(x, 0, z, t) = T_3 & \quad u(x, M, z, t) = T_4 \\u(x, y, 0, t) = T_5 & \quad u(x, y, N, t) = T_6\end{aligned} \tag{14}$$

Para encontrar una solución que satisfaga (10) junto con (14), buscamos una función que describa la distribución de temperaturas para el caso estacionario que llamaremos $g(\vec{x})$, esta función satisface $g_t(\vec{x}) = 0$ por lo tanto, $\nabla^2 g(\vec{x}) = 0$, la función $g(\vec{x})$ satisface la ecuación de Laplace [16,18]. La solución se propone entonces de la siguiente forma [15]

$$u(\vec{x}, t) = v(\vec{x}, t) + g(\vec{x}) \tag{15}$$

donde

$$g(\vec{x}) = \sum_{i=1}^6 g_i(\vec{x}) \tag{16}$$

y cada función $g_i(\vec{x})$ satisface las condiciones de frontera

$$\begin{aligned}g_1(0, y, z, t) = T_1 & \quad g_1(L, y, z, t) = 0 \\g_1(x, 0, z, t) = 0 & \quad g_1(x, M, z, t) = 0 \\g_1(x, y, 0, t) = 0 & \quad g_1(x, y, N, t) = 0.\end{aligned} \tag{17}$$

respectivamente para cada cara. En consecuencia, la función $v(\vec{x}, t)$ satisface la ecuación del calor con las condiciones

$$u(0, x, y, t) = v(0, x, y, t) + g(0, x, y) \tag{18}$$

por lo tanto la solución $v(0, x, y, t)$ satisface condiciones de frontera homogéneas y se escribe en la forma (12), la condición inicial se calcula

$$u(x, y, z, 0) = v(x, y, z, 0) + g(x, y, z) \tag{19}$$

o bien

$$f(x, y, z) = v(x, y, z, 0) + g(x, y, z) \tag{20}$$

donde los coeficientes en la expansión en serie de Fourier tridimensional [15], [19,20] vienen dados por

$$A_{lmn} = \int_0^N \int_0^L \int_0^M [f(x, y, z) - g(x, y, z)] \times \sin\left(\frac{l\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{M}\right) \sin\left(\frac{n\pi z}{N}\right) dx dy dz. \quad (21)$$

5. Resultados

En esta sección se exponen algunos casos ejemplares, en los que se ilustra la efectividad y validez del modelo desarrollado en la sección anterior. Se toma como objeto de partida un sólido tridimensional cúbico aislado, esto se establece cuando las condiciones de frontera son homogéneas. El sólido es preparado inicialmente con 2 distribuciones de calor, que describen situaciones de interés en las aplicaciones. Cabe señalar que se considera un modelo cúbico, dado que en la práctica la mayoría de pruebas físicas realizables a un material sujeto a tensiones o esfuerzos mecánicos utilizan esta geometría estándar además de impresiones tridimensionales [21].

5.1 Sólido Cúbico Aislado

Tomemos como ejemplo, el caso de un sólido cúbico aislado, para ello suponemos que el volumen esta delimitado en la forma $V = \{\vec{x} \in \mathbb{R} / 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq M, 0 \leq z \leq N\}$, con $L = M = N$, como en la figura 2, en este caso la expresión (11) adquiere la forma

$$u(x, y, z, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} A_{lmn} \sin\left(\frac{l\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi z}{L}\right) \times e^{-(l^2+m^2+n^2)\alpha \frac{\pi^2}{L^2} t}. \quad (22)$$

Para la condición inicial

$$u(x, y, z, 0) = f(x, y, z) \quad (23)$$

la expresión (22) adquiere la forma

$$f(x, y, z) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} A_{lmn} \sin\left(\frac{l\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi z}{L}\right) \quad (24)$$

que es una expansión en serie tridimensional de Fourier para la función $f(x, y, z)$ donde los coeficientes se calculan a partir de

$$A_{lmn} = \int_0^L \int_0^L \int_0^L f(x, y, z) \times \sin\left(\frac{l\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi z}{L}\right) dx dy dz \quad (25)$$

y se mantienen las condiciones de frontera (12).

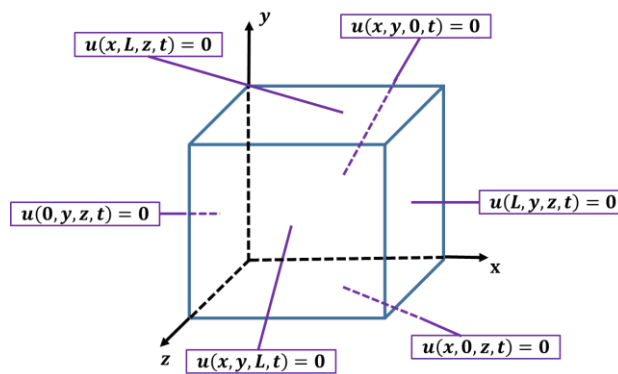


Figura 2: Un sólido cúbico ideal donde las 6 caras se mantienen aisladas.

5.1.1 Caso Lineal

Para esclarecer las características del método desarrollado, supondremos primeramente que la distribución inicial se comporta de manera lineal en la dirección x del sólido de la figura 2. La distribución de temperatura es no uniforme pero lineal a lo largo del eje x , con una temperatura mínima de 26°C en el extremo $x = 0 \text{ m}$ y una temperatura máxima de 90°C en el extremo $x = 0.1 \text{ m}$, matemáticamente esto se expresa en la forma

$$u(x, y, z, 0) = a_0 x + a_1 \quad (26)$$

En la ecuación (26), $a_0 = \frac{62^\circ\text{C}}{0.1\text{m}}$ y $a_1 = 28^\circ\text{C}$ de tal manera que los coeficientes A_{lmn} en la ecuación 22 se calculan a partir de la expresión (23).

En la figura 3 se puede apreciar el comportamiento evolutivo de la distribución inicial de temperatura para varios valores posteriores del tiempo. Es importante notar la distribución inicial al tiempo $t = 0 \text{ min}$; se ve claramente el comportamiento lineal de la posición x como función de la temperatura, en el extremo $x = 0 \text{ m}$ se tiene una temperatura de $T = 26^\circ\text{C}$ y en el extremo $x = 0.1 \text{ m}$ se tiene el valor $T = 90^\circ\text{C}$ como temperatura máxima, La constante α se ha tomado con un valor de $18 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{min}}$ de acuerdo con [22]. Es importante señalar que la

caída abrupta en las fronteras del cubo se debe al fenómeno de Gibbs típico de las series de Fourier para funciones continuas por partes en el intervalo de interés [23].

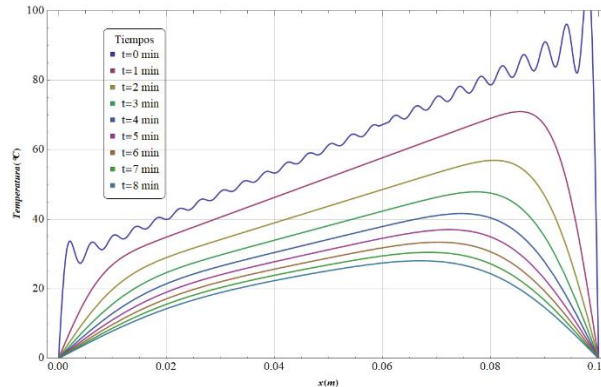


Figura 3: Traza de la función $u(x, 0.9, 0.01, t)$ para un sólido cúbico ideal aislado con $t=0,1,2\dots 8$ minutos.

En la figura 4 se puede apreciar un modelo tridimensional de la distribución de la Temperatura inicial en las coordenadas x y y para $t = 0 \text{ min}$ y $z = 0.01 \text{ m}$

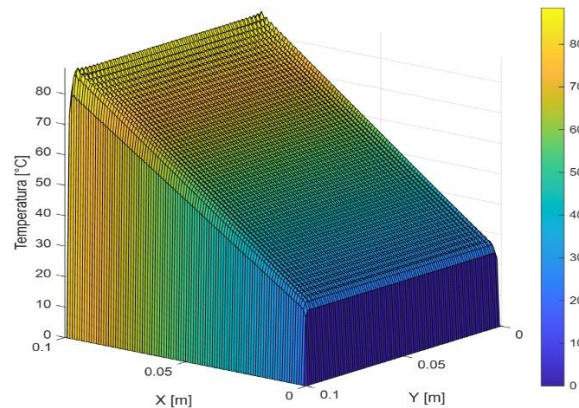


Figura 4: Distribución superficial de la Temperatura para la expresión (25) con $z = 0.01 \text{ m}$ para un sólido cúbico ideal donde las 6 caras se mantienen aisladas con una distribución de temperatura inicial lineal.

5.1.2 Hueco Térmico

El caso interesante para aplicaciones prácticas es aquél en que tenemos un hueco térmico inicial. Este hueco tiene simetría axial a lo largo del eje z y en el punto central del sólido cúbico la temperatura tiene un mínimo $T = 0^\circ\text{C}$ a medida que nos acercamos a las paredes del cubo a lo largo del eje x y el eje y la temperatura aumenta exponencialmente hasta un valor máximo de 90°C justo en las caras del cubo. El modelo correspondiente es

$$u(x, y, z, 0) = 90 \left(1 - e^{-\frac{1}{0.0005}((x-0.05)^2 + (y-0.05)^2)} \right) \quad (27)$$

los coeficientes A_{lmn} en la ecuación (24) se calculan a partir de la expresión (25)

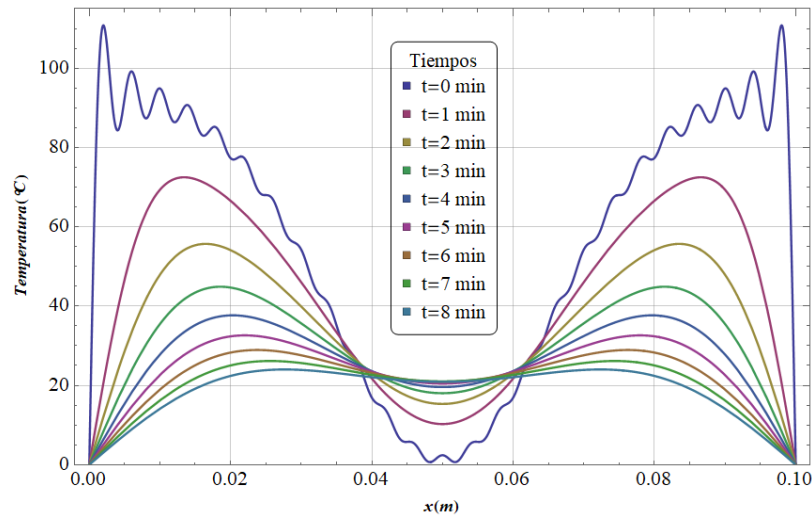


Figura 5: Un sólido cúbico ideal donde las 6 caras se mantienen aisladas y la distribución de temperatura inicial tiene un hueco térmico en el punto central del cubo en $(x = 0.05m, y = 0.05m, z = 0.05m)$.

6. Conclusiones

En el presente trabajo se desarrolla, de manera clara y rigurosa, el modelo analítico de la distribución del calor en un sólido prismático. Se hace énfasis en los principios fundamentales de la física para la deducción de la ecuación del calor, empleada como marco general para modelar la distribución térmica en objetos tridimensionales, en particular en el caso de un cubo. Se obtiene la solución general para un sólido cúbico y se analizan dos casos de interés.

En primer lugar, se considera una distribución inicial lineal en una dirección preferencial, correspondiente a un cubo de material expuesto en una de sus caras a una fuente de calor. En segundo lugar se estudia el caso de un hueco térmico degradado, que puede asimilarse analíticamente al de un hueco cilíndrico en el interior de una geometría cúbica. Este último modelo analítico puede ser de interés para el análisis de la distribución del calor para materiales que presentan perforaciones o huecos interiores en su caracterización.

En los dos casos, al analizar la evolución temporal, se observan comportamientos coherentes con las predicciones del modelo de la ecuación del calor y en concordancia con las leyes vigentes de la termodinámica. En particular, para el caso del hueco térmico, se registra un incremento inicial de temperatura durante los primeros seis minutos de evolución, como se muestra en la figura 6, un resultado relevante ya que, en general, se esperaría que la temperatura dentro del sólido disminuyera con el tiempo. No obstante, posteriormente se aprecia una reducción uniforme de la temperatura en todo el cuerpo, véase la figura 5.

Los casos analizados se estudiaron bajo condiciones de frontera homogéneas, donde el objeto se mantiene aislado y libre de interacción con el entorno. El estudio de configuraciones con fronteras a temperatura fija, que también se aborda en el presente artículo, se reserva para una futura ampliación de este trabajo.

Agradecimientos

Los autores agradecen al estudiante de Ingeniería en Mecatrónica, Leonardo Fabricio Rayas Galindo, por su valioso apoyo en la edición y revisión de algunas secciones de este artículo.

Referencias

1. Acevedo-Díaz, J. A., García-Carmona, A., Aragón-Méndez, M. del M., & Oliva-Martínez, J. M., (2017). Modelos científicos: significado y papel en la práctica científica. *Rev. Cient.*, 30(3), 155–166. doi: 10.14483/23448350.12288.
2. Bizzio, M. de los A., Guirado, A. M., & Maturano Arrabal, C. I., (2024). Uso de simulaciones científicas interactivas para fortalecer la formación inicial de docentes de Química. *Revista Educación*, 48(1), 522–542. doi: 10.15517/revedu.v48i1.56052.
3. Ruiz-Martín, C., (2023). Theory and foundations of modeling and simulation. *The Journal of the Institution of Engineers (India): Series B*. doi: 10.1177/00375497231171140.
4. Tamayo-Roca, C., Roca-Revilla, M., & Nápoles-Quiñones, G., (2017). La modelación científica: algunas consideraciones teórico-metodológicas. *Revista Santiago*, (42), 79–90. doi: 10.15517/revedu.v48i1.56052.
5. Berges Díaz, M., (2009). La modelación como método teórico de la investigación educativa. *Revista Varela*, 9(24), 62–74.
6. Ting, T., Wang, X., Chen, W., & Wang, C., (2023). Model calibration and validation from a statistical inference perspective. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 410, 115771. doi: 10.1016/j.cma.2023.115771.
7. Paquette-Rufiange, J., Lemaire, P., & Gogu, C., (2023). Optimal design of validation experiments for the prediction of quantities of interest. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 412, 115889. doi: 10.1016/j.cma.2023.115889.
8. Caro, J. M., Kolominsky-Rabas, J. M., & Ting, E. S. P., (2023). A review of validation and calibration methods for health care modeling and simulation. *Appl. Health Econ. Health Policy*, 23(2), 135–148. doi: 10.1007/s40258-023-00776-3.
9. Sornette, D., Woodard, R., Zhou, W.-X., & Pisarenko, S. N., (2008). General strategy for physics-based model validation. *Computational Mechanics*, 41(5), 741–752. <https://doi.org/10.1007/s00466-007-0160-5>.
10. Anderson, C. D., (1933). The positive electron. *Physical Review*, 43(6), 491–494. doi: 10.1103/PhysRev.43.491.
11. Abbott, B. P., et al., (2016). Observation of gravitational waves from a binary black hole merger. *Phys. Rev. Lett.*, 116(6), 061102. doi: 10.1103/PhysRevLett.116.061102.
12. Aad, G., et al. (ATLAS Collaboration), (2012). Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC. *Phys. Lett. B*, 716(1), 1–29. doi: 10.1016/j.physletb.2012.08.020.

13. Marvila, M. T., Azevedo, A. R. G., & Monteiro, S. N., (2020). Verification of the application potential of the mathematical models of Lyse, Abrams and Molinari in mortars based on cement and lime. *Journal of Materials Research and Technology*, 9(4), 7327-7334. doi: 10.1016/j.jmrt.2020.04.077.
14. Yue, W., & Wang, B., (2024). Ceramic-added lime and cement mortars: A review of applications in building products. *Sci. Prog.*, 107(3), 0368504241266559. doi: 10.1177/00368504241266559.
15. Haberman, R., (1987). *Elementary applied partial differential equations: With Fourier series and boundary value problems*. 2nd ed., Prentice-Hall.
16. Arfken, G. B., & Weber, H. J., (1995). *Mathematical methods for physicists*. 4th ed., Academic Press.
17. Fourier, J., (1878). *Analytical theory of heat*. Cambridge University Press.
18. Guenther, R. B., & Lee, J. W., (1996). *Partial differential equations of mathematical physics and integral equations*. Dover Publications.
19. Churchill, R. V., (1941). *Fourier and boundary value problems*. McGraw Hill.
20. Mint-U, T., & Debnath, L., (2007). *Linear partial differential equations for scientists and engineers*. 4th ed., Birkhauser Boston.
21. Avila-Navarrete, J. J., & Muñoz-Gómez, J. A. . (2025). Pasta cerámica de bajo costo para impresión 3D. *Revista Ciencia Aplicada*, 1(1), 10-22. <https://www.cienciaplicada.mx/index.php/ciap/article/view/18>
22. Aguilar-Loreto, O., Avila-Navarrete, J. J., & Jiménez-Pérez, A. (2025). Análisis y Modelado de la Distribución Térmica en Morteros. *Revista Ciencia Aplicada*, 1(1), 70-84. [\[Link\]](#)
23. Thompson, W. J. (1992). *Fourier series and the Gibbs phenomenon*. *American Journal of Physics*, 60(5), 425-429. <https://doi.org/10.1119/1.16895>.

Síntesis y caracterización de hidrogeles de PVA-Bórax con conductividad iónica

Andrea H. del Rio¹, J. Antonio Muñoz-Gómez², Daniel E. Ramírez-Arreola²

¹Estudiante Posgrado Ciencia e Ingeniería de Materiales, Departamento de Ingenierías, Universidad de Guadalajara, Av. Independencia Nacional 151, Autlán, Jalisco, México

²Departamento de Ingenierías, Universidad de Guadalajara, Av. Independencia Nacional 151, Autlán, Jalisco, México

Resumen: Los dispositivos electrónicos basados en silicio han sido la solución ideal para el desarrollo de circuitos y sensores electrónicos. Sin embargo, estos materiales son rígidos y frágiles, lo que ha impulsado el desarrollo de nuevos materiales con propiedades dúctiles y conductoras. Este trabajo aborda la síntesis de hidrogeles con propiedades conductoras iónicas como una propuesta de materiales conductivos para el área de la electrónica flexible. Los hidrogeles se obtuvieron a base de alcohol polivinílico (PVA) entrecruzados con tetraborato de sodio (Bórax) mediante la técnica de casting. Se evaluaron seis formulaciones con distintas proporciones de PVA (0.6 y 1.4 g) y Bórax (0.2, 0.6 y 1 g). Los hidrogeles se sumergieron en soluciones electrolíticas de cloruro de sodio (NaCl) y cloruro de calcio (CaCl₂) para inducir la conductividad iónica. La caracterización de los hidrogeles PVA-Bórax se realizó con pruebas de hinchamiento, espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FTIR) y microscopía de barrido electrónico (SEM), lo que permitió una mejor comprensión de los mecanismos de absorción que mejoran su capacidad para retener líquido. Finalmente, se evaluó la conductividad iónica de los hidrogeles utilizando la espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS), otorgando datos experimentales que fueron explicados utilizando el modelo llamado Randles, mostrando un desempeño prometedor en la conductividad iónica detectada en los hidrogeles.

Palabras clave: hidrogeles conductivos, PVA-Bórax, conductividad iónica, electrónica flexible, espectroscopía de impedancia.

1. Introducción

La electrónica basada en silicio ha sido la solución *ad hoc* para el desarrollo de dispositivos electrónicos, sensores y circuitos. Sin embargo, el silicio como otros materiales semiconductores inorgánicos presentan limitaciones para ciertas aplicaciones como las altas temperaturas de fabricación, rigidez mecánica, fragilidad y baja sensibilidad [1]. Estas características han impulsado el desarrollo de nuevos materiales con propiedades dúctiles y conductoras. En las últimas décadas, se han desarrollado hidrogeles conductivos que constituyen una opción prometedora en la electrónica flexible. Estos nuevos materiales son blandos y flexibles, con propiedades comparables a las de los tejidos biológicos, adecuados para aplicaciones biomédicas [2,3].

Los hidrogeles son geles poliméricos hidrofílicos formados por una red tridimensional que tiene la capacidad de absorber agua sin disolverse [4]. Los hidrogeles han estado presentes desde los inicios de la vida en la Tierra. Las biopelículas bacterianas y las estructuras vegetales tienen la capacidad de absorber agua, por lo que presentan hinchamiento. Esto les proporciona un mecanismo de supervivencia que permite la dosificación controlada del agua en periodos de sequía. Este comportamiento ha motivado el desarrollo de materiales sintéticos con propiedades similares.

De 2013 a 2024, el número total de publicaciones sobre hidrogeles y electrónica flexible ha tenido un crecimiento exponencial como se muestra en, Figura 1. En una década, el número de trabajos relacionados con el diseño y las aplicaciones de los hidrogeles en distintos campos del conocimiento se ha cuadruplicado. Este crecimiento refleja el interés internacional en estos materiales, que presentan propiedades atractivas para el diseño de sensores [6-9].

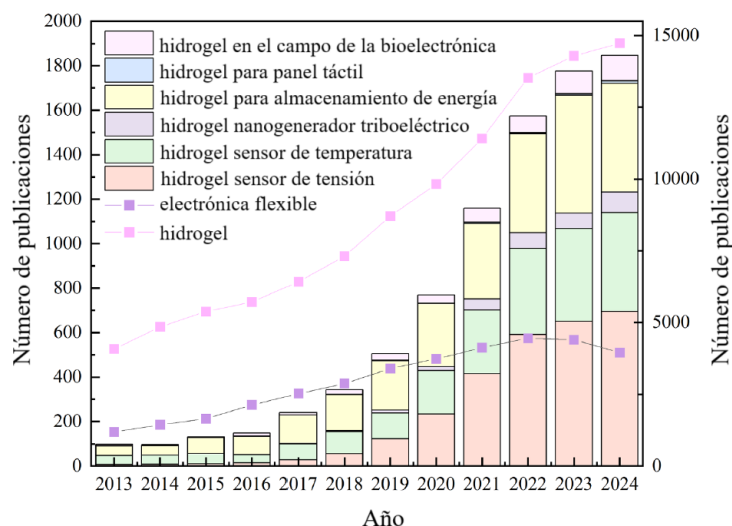


Figura 1. Número total de publicaciones en los últimos 10 años. Según Web of Science, consulta realizada el 17 de diciembre de 2024. Imagen original [9].

Los hidrogeles conductores se pueden clasificar según su mecanismo de conducción: iónicos o electrónicos [10]. La conducción electrónica se logra típicamente mediante la incorporación de nanomateriales, como nanotubos de carbono en la red tridimensional del hidrogel, o mediante la formación de hidrogeles directamente a partir de polímeros conductores [11]. Por su parte, la conducción iónica se obtiene generalmente por medio de soluciones electrolíticas, las cuales son absorbidas por el material o mediante la adición de iones metálicos [12].

Se han publicado diversos estudios que recopilan los avances en el campo de la electrónica flexible basada en hidrogeles. Entre ellos destaca el trabajo de Zhang et al., quien analiza las propiedades y aplicaciones de los hidrogeles conductivos y

proponen una clasificación según la estructura del polímero: hidrogeles de red única y de red dual [13].

Hu et al. muestran una revisión exhaustiva de las aplicaciones más recientes de dispositivos electrónicos flexibles basados en hidrogeles, así como de las relaciones entre las propiedades del hidrogel y el desempeño de los dispositivos. Sin embargo, el uso de estos materiales sigue limitado por restricciones en sus propiedades mecánicas, su biocompatibilidad y su baja conductividad relativa [14].

En el trabajo de Peng et al., se resalta la viabilidad de desarrollar hidrogeles mediante la incorporación de componentes conductores de electrones, como nanopartículas metálicas y polímeros conductores. No obstante, las técnicas de síntesis empleadas y los costos de producción asociados suelen ser complejos y elevados. Asimismo, los autores subrayan que los hidrogeles con conductividad iónica presentan un menor costo de fabricación [12].

En un trabajo reciente, el grupo de Imani et al. investigó diversos métodos convencionales para la fabricación de hidrogeles conductores. Llegaron a la conclusión de que los principales desafíos en estos materiales residen en el desarrollo de un hidrogel conductivo de red única con propiedades combinadas como biocompatibilidad, alta resistencia mecánica, resistencia antimicrobiana, sensibilidad y alta conductividad [15].

En la literatura se describen diversas técnicas de síntesis para elaborar hidrogeles con matriz polimérica, donde se emplean principalmente soluciones iónicas para inducir la conductividad. En el trabajo de X. Di et al., se propone un hidrogel elaborado con alcohol polivinílico (PVA) mediante la técnica de congelamiento, el cual logra una alta conductividad (7.14 S/m) tanto a temperatura ambiente como a temperaturas por debajo de 0 °C [16]. Sin embargo, este método requiere el uso de un ultracongelador, lo que incrementa el costo energético.

En el trabajo de Y. Zhou et al., se emplea PVA como matriz y se agrega hidroxipropilcelulosa (HPC) -- fibras de biopolímero-- para posteriormente sumergir los hidrogeles en una solución salina e inducir la conductividad [17]. Esta propuesta requiere trabajo previo en la selección y preparación de la fibra, lo que incrementa el número de pasos en el proceso de obtención del hidrogel.

En otro artículo, C. Wang et al, resaltan que la elaboración de hidrogeles PVA-Bórax ha demostrado una mayor capacidad de absorción debido al entrecruzamiento químico [18]. Sin embargo, no sumergen los hidrogeles en soluciones electrolíticas y solo analizan su absorción utilizando agua.

A pesar de los avances logrados en esta área de estudio, los cuales se han centrado en analizar la sensibilidad [19], la flexibilidad [16], la capacidad de hinchamiento [20], u otras propiedades mecánicas o químicas [21], aún existe un campo de

desarrollo actual orientado a mejorar la elaboración de hidrogeles con conductividad iónica y a estudiar las variables que inducen el aumento de este tipo de conductividad. Por lo tanto, el desarrollo de nuevos hidrogeles mediante la combinación de polímeros naturales y sintéticos, así como la implementación de nuevas técnicas de síntesis, puede potenciar sus propiedades y mejorar su desempeño.

En este trabajo, se desarrollaron hidrogeles empleando PVA y Bórax mediante la técnica de casting. Para ello, se realizó un experimento con seis formulaciones, utilizando PVA (0.6, 1.4 g) combinadas con Bórax (0.2 g, 0.6 g, 1.0 g). La conductividad iónica fue inducida mediante la inmersión de electrólitos de cloruro de sodio (NaCl) y cloruro de calcio (CaCl₂). Este trabajo propone un método práctico para la síntesis de hidrogeles con PVA y Bórax. La caracterización de los hidrogeles se realizó mediante pruebas de hinchamiento, espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR), microscopía electrónica de barrido y espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS).

El resto de este artículo está organizado de la siguiente manera: en la Sección 2, se describe la metodología para la creación de un hidrogel mediante la técnica de casting y entrecruzamiento químico. En la sección 3, se describe la formulación abstracta de las ecuaciones de impedancia para caracterizar la conductividad iónica. Posteriormente, en la Sección 4, se muestran los resultados principales del estudio. Finalmente, en la Sección 5, se exponen las principales conclusiones.

2. Metodología

En esta sección se describe el procedimiento para preparar hidrogeles de PVA-Bórax con conductividad iónica inducida mediante soluciones electrolíticas. El propósito es ofrecer al lector una explicación más clara y accesible del proceso de síntesis y caracterización de estos hidrogeles conductores.

2.1 Diseño experimental

Para llevar a cabo la síntesis de los hidrogeles se utilizó alcohol polivinílico (PVA) y tetraborato de sodio (Bórax) empleando la técnica de casting [20]. Las soluciones iónicas se prepararon con cloruro de calcio (CaCl₂, 95% de pureza) y con cloruro de sodio (NaCl, 96% de pureza).

En la Figura 2, se visualiza el diseño experimental para la determinación de la mejor formulación del hidrogel, siendo los parámetros de estudio la capacidad de hinchamiento y su conductividad iónica.

La matriz del hidrogel está conformada por PVA, el cual es un polímero que contiene una gran cantidad de grupos hidroxilo, por lo que es soluble en agua. El ácido bórico es el entrecruzante al reaccionar con el PVA para formar los enlaces de

éster bórico [18], siendo uno de los objetivos el dotar de propiedades mecánicas funcionales a la composición óptima.

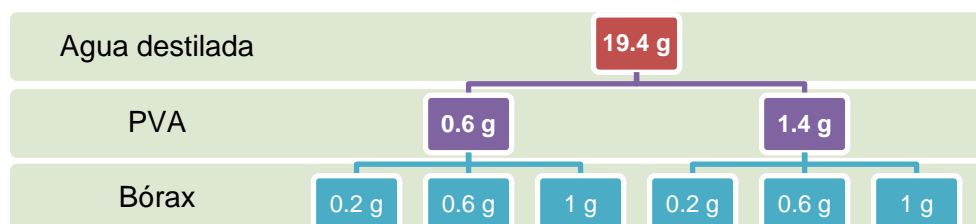


Figura 2. Diseño experimental para la formulación de hidrogeles PVA-Bórax.

El diseño experimental propuesto considera dos diferentes cantidades para PVA y tres para el Bórax, otorgando un total de seis combinaciones, de las cuales solo se reporta la combinación que obtuvo los mejores resultados durante las pruebas de caracterización.

2.2 Preparación de los hidrogeles

Los componentes principales de cada formulación se pesaron utilizando una balanza analítica de alta precisión marca Sartorius, modelo ENTRIS 224I-1S siguiendo el diseño experimental presentado en la Figura 2. Posteriormente, se diluyó el PVA en un matraz de 200 ml utilizando una placa magnética configurada a 90°C y a 150 rpm para mantener una temperatura y una agitación constante durante 40 minutos. En un proceso paralelo se procedió a diluir el Bórax a 80°C y 150 rpm para después incorporarlo al PVA ya diluido. Posteriormente, se vertió la mezcla de PVA con Bórax en una caja de Petri para enfriarlo a una temperatura de 4 °C durante 12 horas. En la Figura 3 se presentan los pasos simplificados para preparar los hidrogeles.

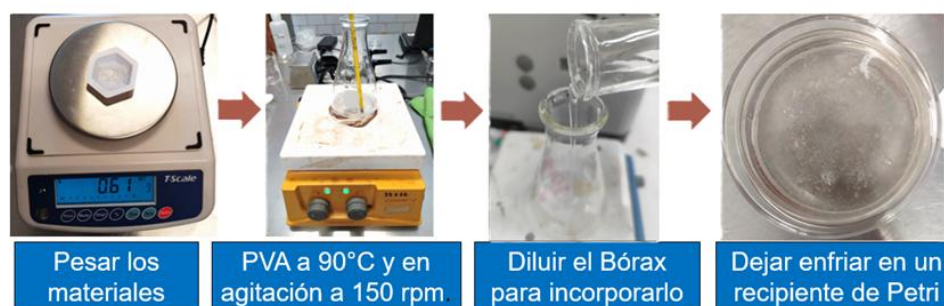


Figura 3. Proceso simplificado para la preparación de los hidrogeles PVA-Bórax.

Una vez que el hidrogel ya se encuentra conformado, se procede a secarlo en un horno a temperatura de 80°C durante 24 horas. El hidrogel al secarse recibe el nombre de xerogel y es este xerogel el que se sumerge en una solución iónica para

obtener el hidrogel conductivo. Las soluciones iónicas que se utilizaron fueron cloruro de sodio (NaCl) y cloruro de calcio (CaCl₂).

2.3 Hinchamiento

Gibas y Janik [8] informaron que el hinchamiento de los hidrogeles es un proceso complejo que consta de varios pasos. En el primer paso, los grupos hidrófilos polares de la matriz del hidrogel se hidratan con agua formando la liga de agua primaria. En el segundo paso, el agua también interactúa con los grupos hidrófobos expuestos y aparecen en forma de agua ligada secundaria. Tanto el agua ligada primaria y la secundaria forman el agua ligada total. En el tercer paso, la fuerza osmótica impulsora de la red hacia la dilución infinita se ve resistida por el entrecruzamiento físico o químico, por lo que se absorbe agua adicional. La cantidad de agua absorbida por un hidrogel depende de la temperatura y de la interacción específica entre las moléculas de agua y las cadenas del polímero, lo que puede explicarse mediante la teoría de Flory-Huggins [9].

La parte sólida del hidrogel es una red de cadenas poliméricas reticuladas, una red tridimensional generalmente denominada malla. La malla retiene el fluido e imparte una fuerza elástica que puede completarse mediante la expansión y contracción del hidrogel y, por lo tanto, es responsable de su solidez. La fase iónica de los hidrogeles suele consistir en grupos ionizables unidos a las cadenas poliméricas y una serie de iones móviles, debido a la presencia del disolvente electrolítico que rodea al hidrogel.

Se estudiaron las propiedades de hinchamiento de los hidrogeles midiendo su cambio de peso durante la absorción de agua a través de una técnica gravimétrica utilizando la siguiente ecuación de saturación [20].

$$\%H = \frac{w - w_0}{w_0} \times 100\% \quad (1)$$

donde w representa el peso del hidrogel en cada medición y w_0 el peso del hidrogel al iniciar la prueba de hinchamiento. Los hidrogeles fueron sumergidos en agua destilada a temperatura ambiente (25 °C). Para determinar los cambios de peso del hidrogel en diferentes intervalos de tiempo, se procedió a pesar cada minuto durante los primeros 20 minutos y, después el intervalo se amplió a 5 minutos hasta alcanzar una hora. En cada medición, se eliminó el exceso de humedad en la superficie con papel filtro antes del pesaje.

2.4 FTIR

La espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FTIR) es una técnica utilizada comúnmente para estudiar y verificar la incorporación de monómeros a la

estructura de hidrogeles, la misma permite observar la presencia de los grupos funcionales característicos de cada monómero [22].

Las muestras de hidrogel fueron secadas para generar el xerogel durante 24 horas en un horno a 60 °C para remover la humedad de su interior. Posteriormente se procedió a moler el xerogel con un molino de aspas durante 5 minutos. Los espectros del polvo de xerogel se registraron utilizando un espectrómetro Jasco FT/IR-4X, con un rango de 4000 a 500 cm^{-1} .

2.5 SEM

La microscopía de barrido electrónico (SEM) es una técnica de obtención de imágenes utilizada en investigación de materiales debido a su alta resolución y capacidades de analizar características morfológicas, estructurales y químicas de las muestras bajo estudio [23].

Las muestras se colocaron bajo vacío, depositando una cantidad adecuada de xerogel sobre un adhesivo utilizando pinzas. Las micrografías se adquirieron con un microscopio JEOL JCM-6000 PLUS para caracterizar la microestructura de los hidrogeles.

2.6 EIS

La espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS) ofrece datos cinéticos y mecánicos de diversos sistemas electroquímicos. Se utiliza ampliamente en estudios de corrosión, ciencia de semiconductores, tecnologías de conversión y almacenamiento de energía, diagnósticos no invasivos, biodetección, entre otros.

La EIS se basa en la perturbación de un sistema electroquímico en equilibrio o en estado estacionario, mediante la aplicación de una señal sinusoidal (tensión o corriente alterna) en un amplio rango de frecuencias y el monitoreo de la respuesta sinusoidal (corriente o tensión, respectivamente) del sistema ante la perturbación aplicada. Considerando que el sistema electroquímico en estudio es un sistema lineal e invariante en el tiempo (la señal de salida está relacionada linealmente con la señal de entrada y el comportamiento no cambia con el tiempo), la EIS es una técnica de "función de transferencia" que modela la señal de salida (corriente alterna o voltaje alterno) a la señal de entrada (voltaje alterno o corriente alterna) en un amplio rango de frecuencias [24].

La importancia de la EIS sobre otras técnicas electroquímicas radica en su capacidad de discriminar y, por tanto, proporcionar una gran cantidad de información sobre diversos procesos eléctricos, electroquímicos y físicos que tienen lugar en un sistema electroquímico real.

Las mediciones EIS en un sistema electroquímico se pueden simular en un circuito eléctrico equivalente, que consta de componentes pasivos comunes (como resistencias, capacitores e inductores) y otros elementos más complejos

(denominados elementos distribuidos), conectados entre sí de diferentes formas. En otras palabras, cada uno de los procesos analizados puede considerarse análogo a un circuito eléctrico equivalente, caracterizado por una constante de tiempo diferente. Para ello, la mayoría de los analizadores electroquímicos incorporan un software adecuado que permite simular los datos de impedancia en un circuito modelo. Un requisito previo para la simulación de los datos EIS en un circuito eléctrico equivalente es que se haya evaluado la validez de los datos obtenidos. Lo anterior se puede hacer ejecutando la prueba Kramers-Kroning, que está disponible en la mayoría del software que viene con los analizadores electroquímicos. Considerando que no existe un modelo de circuito único para un espectro de impedancia dado y la calidad del modelado aumenta con el número de componentes incluidos en el circuito, es importante que cada componente esté correlacionado con un proceso individual mediante lógica científica.

Al trabajar en el dominio de la frecuencia, en un amplio rango de frecuencias, la EIS simplifica un sistema electroquímico complejo deconvolucionándolo en procesos individuales con diferentes constantes de tiempo, que luego pueden analizarse de manera más precisa. Los procesos lentos pueden analizarse en frecuencias bajas, mientras que los procesos rápidos pueden analizarse en frecuencias altas.

En la práctica, el rango de frecuencia está determinado por las limitaciones asociadas con la instrumentación disponible, el cableado del sistema electroquímico con el instrumento de medición y la estabilidad del propio sistema electroquímico a lo largo del tiempo.

La medición de la impedancia de los hidrogeles PVA-Bórax con solución iónica utilizando la EIS se realizó con el potencióstato GAMRY 1010E con la configuración de tres electrodos que se observa en la Figura 4.

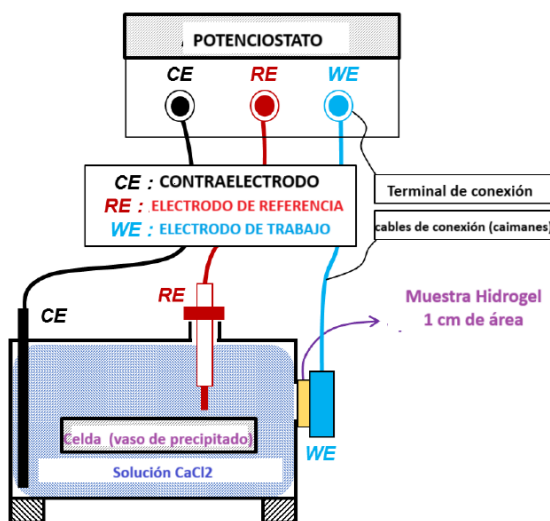


Figura 4. Conexiones de la celda electroquímica al potenciostato. Imagen original [25].

El electrodo de referencia (RE) y el contraelectrodo (CE) fueron electrodos de acero y la muestra de un centímetro cuadrado de área del hidrogel PVA-Bórax fue utilizado como electrodo de trabajo (WE) colocado en un material de acero donde el área de exposición fue de $1\text{ cm} \times 1\text{ cm}$. Los tres electrodos se distribuyeron de forma equidistante dentro de la celda electroquímica. Las soluciones iónicas utilizadas fueron NaCl y CaCl₂, pero para la medición de control se utilizó agua destilada. El rango de frecuencia considerado fue de 100 mHz a 1 MHz con 10 puntos por década.

3. Modelo matemático

La caracterización de los datos de impedancia son el punto de partida para modelar su dinámica. Para ello, se utiliza un modelo matemático que permita explicar el comportamiento observado durante la prueba EIS del hidrogel PVA-Bórax con conductividad iónica inducida.

Empleando la caracterización en frecuencia, se encontró que el circuito de Randles modela la impedancia electroquímica de una interfase y se ajusta a muchos sistemas electroquímicos. Utilizando la técnica EIS, se busca determinar los parámetros del modelo matemático del circuito Randles de la Figura 5.

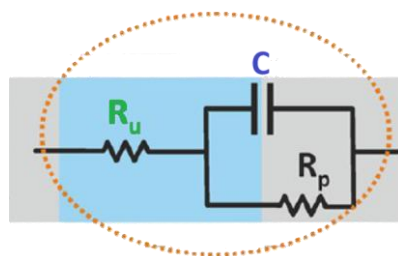


Figura 5. Circuito Randles. Imagen original [24].

El circuito Randles tiene tres elementos, una resistencia en serie R_u con la combinación en paralelo de un capacitor C y una resistencia R_p . En electroquímica, cada uno de los componentes representa una sección del fenómeno electroquímico, como se describe a continuación:

- R_u : resistencia de solución entre los electrodos de trabajo y de referencia.
- R_p : resistencia de polarización o una resistencia de transferencia de carga en la interfase electrodo-solución.
- C : capacitancia de doble capa en la interfase (modelo ideal o constante de fase).

La ecuación de impedancia del circuito de la Figura 5, queda expresada como:

$$Z = R_u + \frac{1}{\frac{1}{R_p} + j\omega C} \quad (2)$$

donde R_u corresponde a la resistencia en serie, R_p es la resistencia en paralelo con el capacitor C el cual varía su valor respecto a la frecuencia porque $\omega = 2\pi f$.

El circuito Randles es un modelo fundamental y el punto de partida para modelar sistemas más complejos de reacciones electroquímicas. Se utiliza en la técnica EIS para interpretar espectros de impedancia [24].

4. Resultados Experimentales

En esta sección se presentan los resultados obtenidos para cada una de las caracterizaciones realizadas a los hidrogeles PVA-Bórax.

4.1 Hinchamiento

La Figura 6 muestra la gráfica obtenida durante la prueba de hinchamiento al hidrogel con la formulación (PVA 0.6g, Bórax 1.4g). En el eje de las abscisas se encuentra el tiempo que registra de 0 a 35 minutos y en el eje de las ordenadas se encuentra el porcentaje obtenido del hidrogel siguiendo el proceso descrito en la sección 2.3 y mediante la ecuación (1). En la gráfica se observa un incremento pronunciado del porcentaje de hinchamiento en los primeros 10 minutos, indicando que existe una rápida absorción de líquidos. Después de los 10 minutos se detecta que el proceso de hinchamiento continua, pero empieza a desacelerarse. A partir de los 20 minutos se alcanza una meseta, lo que indica que alcanzó la saturación del hidrogel, es decir, a su límite de capacidad de hinchamiento.

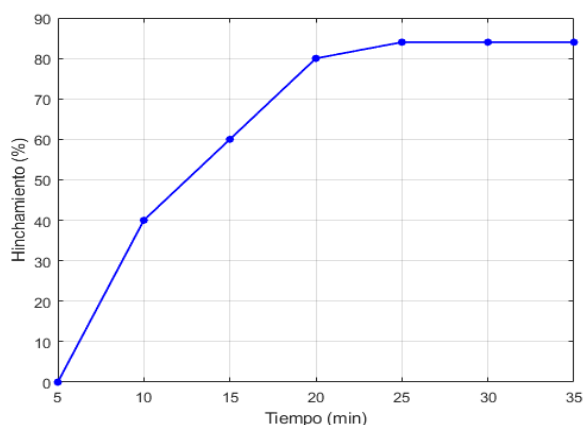


Figura 6. Gráfica de hinchamiento del hidrogel con formulación 0.6 g PVA y 1 g Bórax.

El sistema alcanza el máximo porcentaje de hinchamiento en 20 minutos, y no mejora significativamente después de eso, principalmente porque el hidrogel comienza a desmoronarse en el líquido.

4.2 Caracterización FTIR

La Figura 7, permite visualizar los espectros FTIR de los materiales PVA y Bórax en su estado inicial, en conjunto con el espectro FTIR del xerogel PVA-Bórax. Además, en la misma Figura 7, se incluye una tabla con los rangos de los números de onda detectados en los picos de los tres espectros FTIR. Los espectros se obtuvieron siguiendo el proceso de la sección 2.4 que se encuentra en este escrito. En el espectro del PVA se detecta la banda del grupo O-H (alcohol) entre la longitud típica de 3000-3600 y los grupos metileno C-H al detectar el pico 2909 cm^{-1} . Estas señales son consistentes con la estructura del PVA, un polímero lineal con grupos hidroxilo disponibles para interacción química. En el espectro del Bórax se detectan los picos 1339 cm^{-1} y 999 cm^{-1} , los cuales se asocian al estiramiento del enlace B-O y B-O-B, respectivamente, confirmando la presencia de unidades estructurales de borato.

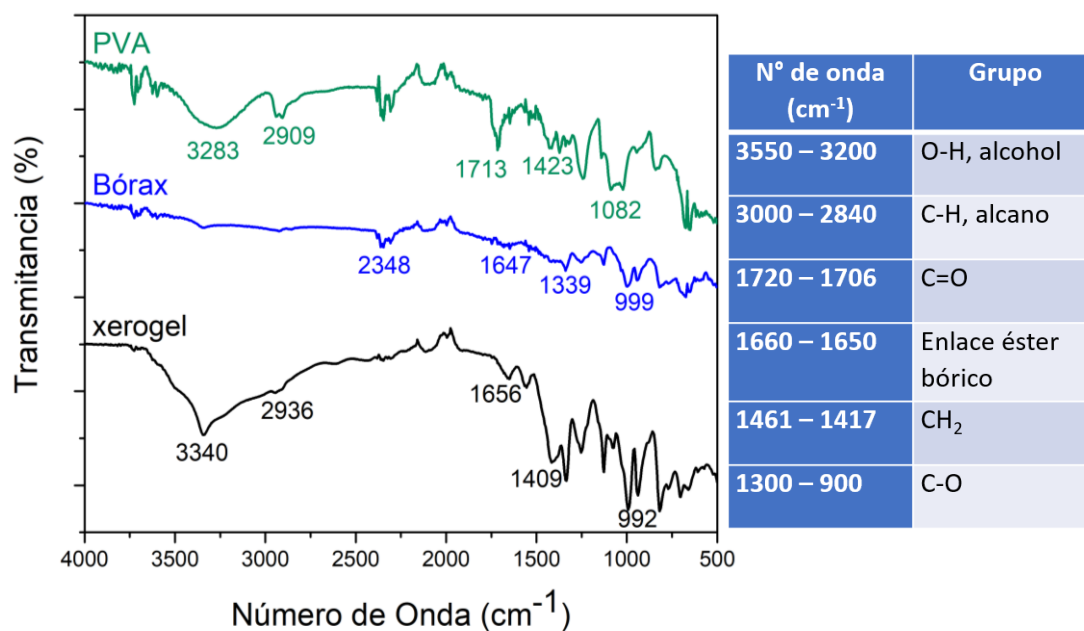


Figura 7. Comparación de los espectros FTIR del PVA, Bórax y el xerogel (derecha). Tabla de los rangos de número de onda obtenidos en los espectros FTIR analizados.

El xerogel muestra bandas que provienen tanto del PVA como del Bórax, confirmando la interacción de ambos compuestos. El desplazamiento del pico O-H de 3283 cm^{-1} (PVA) a 3340 cm^{-1} (xerogel) sugiere la formación de nuevos enlaces químicos, típicamente debidos a la reticulación con el Bórax. El pico en 992 cm^{-1} aparece tanto en el espectro del Bórax como en el del xerogel, lo que indica la preservación de la estructura del boro en la red final.

4.3 Micrografía obtenida por SEM

El hidrogel sintetizado tiene una estructura porosa en su concepción. Esto se puede apreciar por la presencia de orificios (poros) que se asemejan a la superficie

de una esponja comercial. En la Figura 8, se muestra la morfología del xerogel con una micrografía con 400 aumentos. Lo anterior permite confirmar la red tridimensional característica de los hidrogeles, garantizando su propiedad de hinchamiento.

Sin embargo, es posible observar que al momento de secar el hidrogel para obtener el xerogel, los poros del hidrogel colapsan y solo es posible observar poros del tamaño de micrómetros.

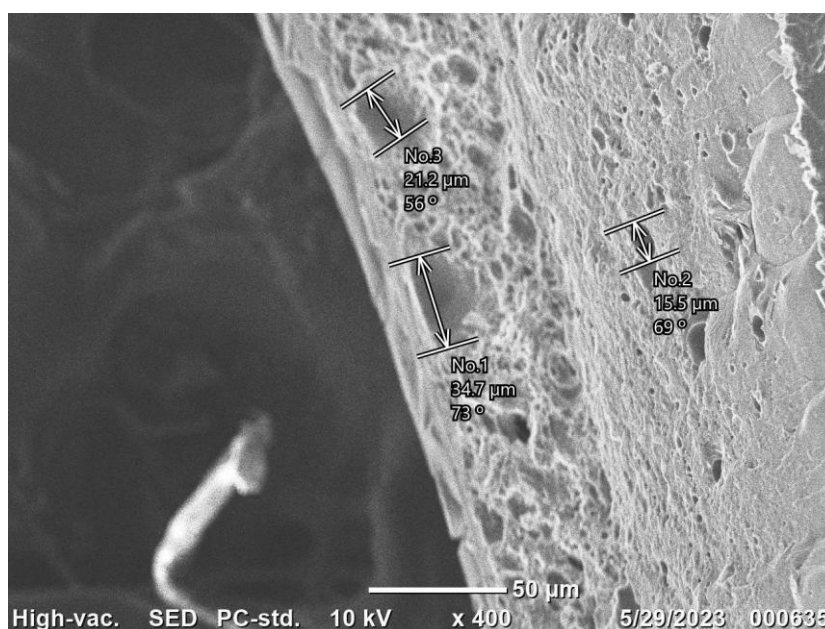


Figura 8. Micrografía del xerogel, aumento 400x.

Otra alternativa para mejorar las micrografías es realizar el proceso de liofilización a los hidrogeles PVA-Bórxax con el fin de observar los poros sin colapsar. Sin embargo, la Figura 8 permite dar un indicio de la porosidad del material, que es lo importante de resaltar en esta caracterización.

4.4 Diagramas de Bode

En las Figuras 9 y 10 se presentan los diagramas de Bode obtenidos mediante la técnica EIS, descrita en la sección 2.6. Para su obtención se utilizaron las soluciones iónicas con NaCl y el CaCl₂, respectivamente.

En ambos diagramas de Bode, en el eje horizontal se representa la frecuencia expresada en escala logarítmica (Hz), en un rango de 10⁻¹ Hz hasta 10⁵ Hz. En el eje vertical se muestra el módulo de la impedancia |Z|, también en escala logarítmica, que abarca desde 10² a 10⁴ Ω. La curva representada por los puntos azules

corresponden a los datos experimentales de impedancia. El ajuste teórico, basado en el modelo matemático Randles, se despliega con una línea continua de color rojo.

En la Figura 9 se puede apreciar que a frecuencias bajas (< 1 Hz), el módulo de la impedancia es alto ($10^4 \Omega$), indicando que domina la resistencia de transferencia de carga y el comportamiento capacitivo. A medida que la frecuencia aumenta, la impedancia disminuye de forma continua y en el rango de 1 Hz a 10^3 Hz, se observa una transición típica del cambio de dominancia entre elementos resistivos y capacitivos del sistema. A frecuencias altas ($> 10^4$ Hz), la impedancia tiende a estabilizarse alrededor de $10^0 \Omega$, lo que representa la resistencia del electrolito (R_u).

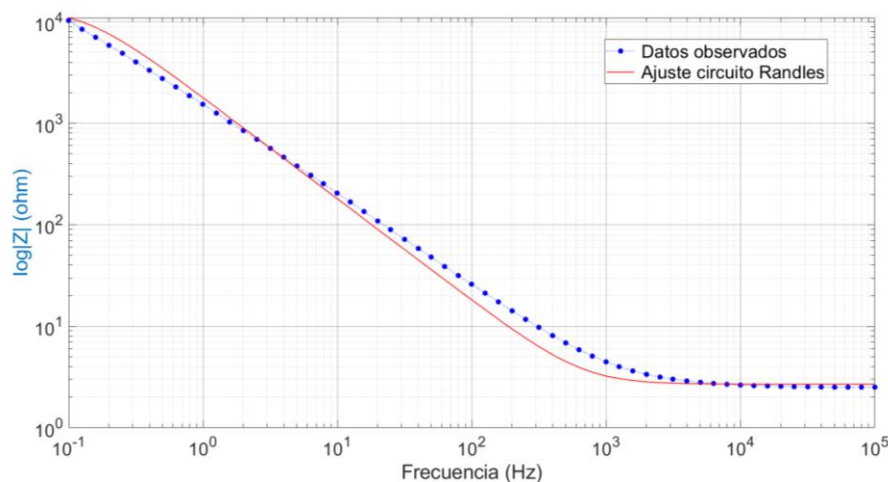


Figura 9. Diagrama de Bode de Impedancia Electroquímica utilizando la solución NaCl.

El diagrama muestra un buen ajuste del modelo de Randles a los datos de impedancia obtenidos al sumergir el hidrogel PVA-Bórax en solución de NaCl. Sin embargo, el pequeño desajuste en la zona media puede indicar la necesidad de modelos más complejos, dependiendo de la precisión deseada.

En la Figura 10, se observa que a baja frecuencia (izquierda del diagrama de Bode) la impedancia es alta ($> 10^3 \Omega$), y lo anterior, sugiere un dominio capacitivo, donde la resistencia de polarización o transferencia de carga y la capacitancia tienen un efecto significativo. En la frecuencia media (10 – 1000 Hz) se observa una caída rápida en $|Z|$, lo que indica una transición de comportamiento capacitivo a resistivo. La impedancia a alta frecuencia ($> 10^4$ Hz) se estabiliza en torno a 10Ω , lo que sugiere que la contribución resistiva está bien definida.

Se puede concluir que el sistema electroquímico de CaCl_2 muestra un comportamiento típico de un electrodo con transferencia de cara controlada, siendo el modelo de Randles adecuado para describir el sistema, aunque reconociendo que a bajas frecuencias puede faltar un componente de difusión. El buen ajuste a frecuencias altas sugiere una conductividad iónica adecuada de la solución de CaCl_2 .

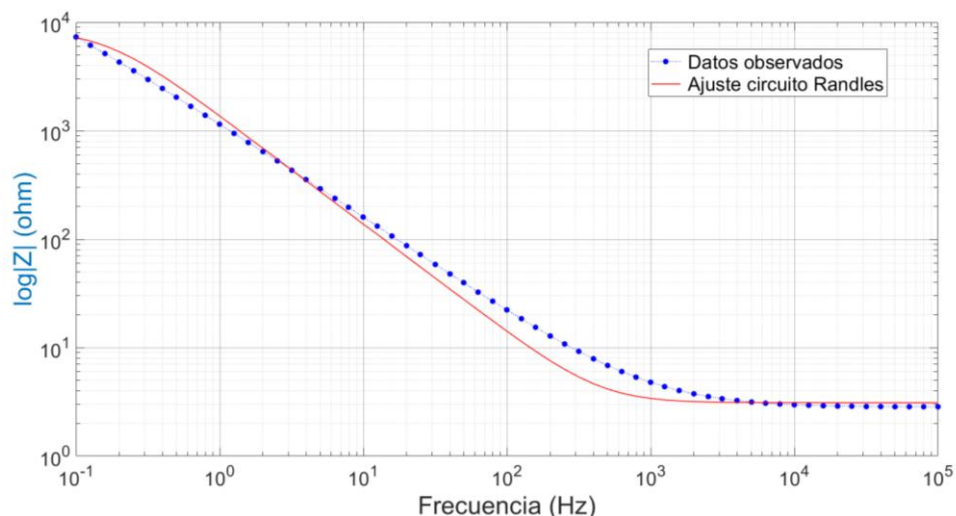


Figura 10. Diagrama de Bode de Impedancia Electroquímica utilizando la solución CaCl_2 .

Cabe mencionar que el ajuste de los datos al modelo Randles se realizó mediante el software nativo del potencióstato. Actualmente, se trabaja en el desarrollo de una herramienta de software de código libre que permitirá realizar el ajuste numérico de los datos sensados empleando distintos esquemas de aproximación numérica.

4.5 Simulación Numérica

En la Tabla 1 se muestran los valores de los componentes del circuito Randles, Figura 5, obtenidos mediante la prueba EIS a los hidrogeles PVA-Bórax.

Tabla 1. Resultados obtenidos de los componentes del circuito de Randles mediante el ajuste no lineal del modelo matemático.

Componentes	R_p	R_u	C_f
Unidades	Ohm Ω	Ohm Ω	Faradios F
CaCl_2	8.523×10^3	3.101	115.2×10^{-6}
NaCl	13.85×10^3	2.682	88.29×10^{-6}

Al sumergir los hidrogeles en las dos diferentes soluciones iónicas, se detectaron valores menores de resistencia a la conductividad iónica usando el CaCl_2 . Sin embargo, será necesario realizar otras mediciones con diferentes configuraciones de electrodos para corroborar esta medición.

4.6 Pruebas mecánicas

El hidrogel PVA-Bórax está basado en enlaces físicos reversibles, principalmente puentes de hidrógeno y enlaces entre grupos hidroxilo del PVA y los iones borato. Estos enlaces son relativamente débiles comparados con enlaces covalentes, lo que otorga al hidrogel propiedades viscoelásticas, pero también una baja resistencia mecánica. Además, al hincharse el hidrogel, su contenido de agua lo hace blando y fácilmente deformable, dificultando la aplicación de cargas mayores a 5 MPa.

Cabe señalar que el presente trabajo se centra en la caracterización de hidrogeles obtenidos de forma experimental mediante la técnica de casting. Durante la manipulación, las muestras exhibieron una alta fragilidad estructural y falta de cohesión mecánica, lo que impidió su correcta sujeción y posterior estiramiento. Esto imposibilitó el estudio de las propiedades mecánicas del hidrogel PVA-Bórax conforme a la Norma ASTM-D882-00.

5. Conclusiones

En este trabajo se aborda la síntesis de hidrogeles a base de alcohol polivinílico (PVA) entrecruzado con tetraborato de sodio (Bórax) mediante la técnica de casting. Se evaluaron seis formulaciones con distintas proporciones de PVA (0.6 y 1.4 g) y Bórax (0.2, 0.6 y 1 g). Los hidrogeles se sumergieron en soluciones electrolíticas de NaCl y CaCl₂, para inducir la conductividad iónica. Los hidrogeles sumergidos en CaCl₂ presentaron una menor resistencia iónica en comparación con los tratados con NaCl, lo que indica una mayor conductividad en presencia de Ca²⁺. Se observó un hinchamiento máximo del 84 % en los hidrogeles de PVA-Bórax preparados con 0.6 g de PVA y 1 g de Bórax, indicando una adecuada absorción de líquido por la red polimérica. El ajuste no lineal del modelo Randles permitió determinar el estado estacionario, el cual es modelado mediante la resistencia R_p, la cual describe la polarización entre el electrodo y la solución.

Como trabajo futuro, se contempla la determinación de nuevas formulaciones de PVA-Bórax para mejorar las propiedades mecánicas y de absorción de los hidrogeles. Asimismo, se propone la incorporación de doble reticulación con el fin de prolongar la cohesión mecánica del hidrogel.

Agradecimientos

El autor expresa su gratitud a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SEICHTI), por el apoyo recibido para el desarrollo del trabajo de investigación a través de la beca de doctorado (2022-000002-01NACF-07717).

Referencias

1. N. Lu, D. H. Kim, "Flexible and Stretchable Electronics Paving the Way for Soft Robotics," *Soft Robotics*, vol. 1, no. 1, pp. 53–62, 2013. <https://doi.org/10.1089/soro.2013.0005>
2. L. Ionov, "Hydrogel-based actuators: Possibilities and limitations," *Materials Today*, vol. 17, no. 10, pp. 494–503, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2014.07.002>

3. F. Mo, Y. Lin, Y. Liu, P. Zhou, J. Yang, Z. Ji and Y. Wang, "Advances in ionic conductive hydrogels for skin sensor applications," *Materials Science & Engineering: R: Reports*, vol. 165, pp. 100989, 2025. <https://doi.org/10.1016/j.mser.2025.100989>
4. L. Liu, G. Pan, L. Wang, et al. "Hybrid Hydrogels Toughened by Chemical Covalent Bonding and Physical Electrostatic Interactions," *Chemical Research in Chinese Universities*, vol. 34, pp. 500-505, 2018. <https://doi.org/10.1007/s40242-018-7375-z>
5. F. Ullah, M. B. Hafi Othman, F. Javed, Z. Ahmad, H. Md. Akil, "Classification, processing and application of hydrogels: A review," *Material Science and Engineering: C*, vol. 57, pp. 414-433, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.msec.2015.07.053>
6. J. Chen, Y. Zhu, X. Chang, D. Pan, G. Song, Z. Guo, N. Naik, "Recent Progress in Essential Functions of Soft Electronic Skin", *Advanced Functional Materials*, vol. 31, no. 42, pp. 2104686, 2021. <https://doi.org/10.1002/adfm.202104686>
7. O. Wichterle, D. Lim, "Hydrophilic Gels for Biological Use," *Nature*, vol. 185, pp. 117-118, 1960. <https://doi.org/10.1038/185117a0>
8. I. Gibas and H. Janik, "Review: Synthetic Polymer Hydrogels for Biomedical Applications," *Chemistry & Chemical Technology*, vol. 4, no. 4, pp. 297-304, 2010. <https://doi.org/10.23939/chcht04.04.297>
9. F. Ganji, S. Vasheghani-Farahani, E. Vasheghani-Farahani, "Theoretical Description of Hydrogel Swelling: A Review," *Iranian Polymer Journal*, vol. 19, no. 5, pp. 375-398, 2010. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:139000502>
10. T. Zhu, Y. Ni, G.M. Biesold, Y. Cheng, M. Ge, H. Li, J. Huang, Z. Lin, Y. Lai, "Recent advances in conductive hydrogels: classifications, properties, and applications", *Chemical Society Reviews*, vol. 52, no. 2, pp. 473-509, 2022. <https://doi.org/10.1039/D2CS00173J>
11. Y. Shi, C. Ma, L. Peng, G. Yu, "Conductive "Smart" Hybrid Hydrogels with PNIPAM and Nanostructured Conductive Polymers", *Advance Function Materials*, vol. 25, pp. 1219-1225, 2015. <https://doi.org/10.1002/adfm.201404247>
12. Q. Peng, J. Chen, T. Wang, X. Peng, J. Liu, X. Wang, et al. "Recent advances in designing conductive hydrogels for flexible electronics," *InfoMat*, vol. 2, no. 5, pp. 843-865, 2020. <https://doi.org/10.1002/inf2.12113>
13. W. Zhang, H. Zhang, H. Kim, Pooi See Lee, et al. "Ways forward with conductive hydrogels: Classifications, properties, and applications in flexible electronic and energy gadgets," *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 163, 2025. <https://doi.org/10.1016/j.mser.2024.100923>
14. L. Hu, P. Chee, S. Sugiarto, Y. Yu, C. Shi, R. Yan, et al. "Hydrogel-based flexible electronics," *Advanced Materials*, vol 35, no. 14, 2023. <https://doi.org/10.1002/adma.202205326>
15. K. Imani, J. Dodda, J. Yoon, F. Torres, A. Imran, G. Deen, et al. "Seamless integration of conducting hydrogels in daily life: from preparation to wearable application," *Advance science*, vol. 11, no. 13, 2024. <https://doi.org/10.1002/advs.202306784>
16. X. Di, Q. Ma, Y. Xu, M. Yang, G. Wu, and P. Sun, "High-performance ionic conductive poly (vinyl alcohol) hydrogels for flexible strain sensors based on a universal soaking strategy," *Materials Chemistry Frontiers*, vol. 5, no. 1, pp. 315-323, 2021. <https://doi.org/10.1039/D0QM00625D>
17. Y. Zhou et al. "Highly Stretchable, Elastic, and Ionic Conductive Hydrogel for Artificial Soft Electronics," *Advance Functional Materials*, vol. 29, no. 1, pp. 1-8, 2019. <https://doi.org/10.1002/adfm.201806220>

18. C. Wang, Z. Shen, P. Hu, et al. "Facile fabrication and characterization of high-performance Borax-PVA hidrogel," *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, vol. 101, pp. 103-113, 2022. <https://doi.org/10.1007/s10971-021-05584-0>
19. V. Ugrinovic, V. Panic, P. Spasojevic, et al. "Strong and tough, pH sensible, interpenetrating network hydrogels based on gelatin and poly (methacrylic acid)," *Polymer Engineering & Science*, vol. 62, no. 3, pp. 622-636, 2022. <https://doi.org/10.1002/pen.25870>
20. J. Li, Y. Wu, J. He, et al. "A new insight to the effect of calcium concentration on gelation process and physical properties of alginate films," *Journal of Materials Science*, vol. 51, pp. 5791-5801, 2016. <https://doi.org/10.1007/s10853-016-9880-0>
21. M. J. Lee, D. R. Shrotriya, and R. M. Espinosa-Marzal, "Responsiveness of charged double network hydrogels to ionic environment," *Advanced Functional Materials*, vol. 34, no. 37, pp. 2402279, 2024. <https://doi.org/10.1002/adfm.202402279>
22. M. A. Mohamed, J. Jaafar, A. F. Ismail, M. H. D. Othman, M.A. Rahman, "Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy," *Membrane characterization*, pp. 3-29, 2017. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63776-5.00001-2>
23. A. Mohamed, A. Abdullah, "Scanning electron microscopy (SEM): A review," Proceedings of the 2018 international conference on hydraulics and pneumatics—HERVEX, Băile Govora, Romania, 2018, pp. 7-9.
24. A. Ch. Lazanas and M. I. Prodromidis, "Electrochemical Impedance Spectroscopy—A Tutorial," *ACS Measurement Science Au*, vol. 3, no. 3, pp. 162-193, 2023. <https://doi.org/10.1021/acsmeasuresciau.2c00070>
25. H. B. Choe, H. S. Lee, M. A. Ismail and M. W. Hussin, "Evaluation of Electrochemical Impedance Properties of Anticorrosion Films by Arc Thermal Metal Spraying Method," *International Journal of Electrochemical Science*, vol. 10, no. 11, pp. 9775-9789, 2015. [https://doi.org/10.1016/S1452-3981\(23\)11219-3](https://doi.org/10.1016/S1452-3981(23)11219-3)