



**TECNOLOGICO
DE MONTERREY.**

**Campus Ciudad de México
División de Ingeniería y Arquitectura**

PROYECTO

**Validación e implementación del Simulador de Propiedades Eléctricas y
Ópticas de Materiales Moleculares (SPEOMM) para el desarrollo de aplicaciones
de Materiales Moleculares mediante el uso de LabView®**

**Cristina Tehaní Aparicio García
Luis Villarreal Real**



**TECNOLOGICO
DE MONTERREY**

Biblioteca
Campus Ciudad de México

México, D.F.

Noviembre 2006

ÍNDICE

i. Índice de Materiales Moleculares.	3
Capítulo 1. Introducción	4
1.1 Introducción	4
1.2 Objetivo General	4
1.3 Objetivos Particulares	4
1.4 Metas	5
1.5 Estado del Arte	5
Capítulo 2. Antecedentes	6
2.1 Teoría de los Materiales Moleculares	6
2.1.1 Medidas de conductividad eléctrica	9
2.1.2 Medidas de espectroscopia resonancia paramagnética (EPR)	12
2.1.3 Medidas de susceptibilidad magnética estática	12
2.1.4 Espectroscopías ópticas: UV-vis, IR y Raman	13
2.2 Componentes del Simulador.	17
2.2.1 Módulo Eléctrico	17
2.2.2 Módulo Óptico	18
2.2.3 Módulo IR	19
Capítulo 3. Construcción del sistema de ayuda	20
Capítulo 4. Validación y corrección de SPEOMM	21
4.1 Validación Eléctrica	21
4.2 Validación Óptica	39
4.3 Validación de Espectroscopia IR	47
4.4 Modificaciones realizadas en el programa	50
Capítulo 5. Implementación de SPEOMM para el desarrollo de aplicaciones prácticas de Materiales Moleculares	56
5.1 Análisis específico de propiedades eléctricas de los Materiales Moleculares	56
5.2 Justificación de implementación de Materiales Moleculares	57
5.2.1 Normas Ambientales	57
5.2.2 Material del recubrimiento (losetas) del trasbordador espacial	58
5.2.2.1 Implementación de MM's	61
5.2.3 Sobrecalentamiento del motor de un automóvil	61

5.2.3.1 Problema con el termostato	62
5.2.3.2 Implementación de MM's	62
5.2.3.3 Problema con el ventilador	62
5.2.3.4 Implementación de MM's	62
5.3 Relación de la virtualización de MM's con SPEOMM .	63
Capitulo 6. Simulación en LabView® de las características del Material Molecular .	64
6.1 Programa de Virtualización de MM's en LabView®	64
6.2 Simulación del comportamiento eléctrico del Material Molecular	65
6.3 Obtención de la ecuación característica del Material Molecular	66
6.4 Aproximaciones de la curva característica	67
6.4.1 Lineal .	68
6.4.2 Cuadrática	69
6.4.3 Polinomial	70
Capítulo 7. Simulación en LabView® del modelo físico del calentamiento del motor	71
7.1 Análisis del funcionamiento del sistema refrigerante del motor de un coche	71
7.2 Obtención de los parámetros ingenieriles del modelo físico	72
7.3 Simulación del comportamiento y temperatura estable del modelo físico	73
Capítulo 8. Base de Datos de los Materiales Moleculares .	75
Capítulo 9. Hardware in the Loop .	76
9.1 Conexión TCP/IP	77
9.2 Interacción entre el modelo físico y el sistema sensorial	78
Capítulo 10. Conclusiones	79
Referencias	80
Anexo 1. Tablas de datos de propiedades eléctricas de Materiales Moleculares	81
Anexo 2. Tabla de comparación de coeficiente de absorción del material 18FtCo1 antes de la corrección	90
Anexo 3. Imágenes del Tutorial de SPEOMM .	91

i. Índice de Materiales Moleculares

Los materiales utilizados para el desarrollo de este trabajo se muestran a continuación. En general fueron los mismos compuestos, pero se prepararon varias películas y pastillas, para realizar una gran cantidad de mediciones eléctricas y ópticas.

Simbología	Significado
18FtCo	$C_{46}H_{23}N_8O_4Co$
18FtCo1	$C_{46}H_{23}N_8O_4Co$
18FtCo2	$C_{46}H_{23}N_8O_4Co$
18FtPb1	$C_{46}H_{23}N_8O_4Pb$
18FtPb2	$C_{46}H_{23}N_8O_4Pb$
18HF231	$C_{46}H_{23}N_8O_4Fe$
18HF232	$C_{46}H_{23}N_8O_4Fe$
3FPbK11	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK12	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK13	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK14	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK15	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK16	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK17	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK18	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK19	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK110	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK111	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK112	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK113	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
3FPbK114	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
BOC10R	$C_{18}H_{24}O_6CrFe$
BOC11R	$C_{18}H_{24}O_6CrFe$
FCoK1	$C_{46}H_{22}N_8O_4KCo$
FCoK2	$C_{46}H_{22}N_8O_4KCo$
FPbK1	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
FPbK2	$C_{46}H_{22}N_8O_4KPb$
KF231	$C_{46}H_{22}N_8O_4KFe$
KF232	$C_{46}H_{22}N_8O_4KFe$

Capítulo 1

Introducción

1.1 Introducción

La revolución tecnológica de nuestros días induce a los científicos, investigadores e ingenieros a desarrollar soluciones competentes en el mundo industrial que vivimos. Aspectos económicos, ecológicos y tecnológicos son los que llevan a pensar en nuevas soluciones capaces de sustituir las anteriores. El área de la electrónica, especialmente la que corresponde a las computadoras y circuitos electrónicos es constantemente influenciada por la nueva tecnología, basada en la teoría de Scalling Down, es decir, realizar los componentes cada vez más pequeños sin que pierdan sus propiedades y su objetivo principal.

Debido a las limitaciones de la industria del silicio, y de otros materiales inorgánicos utilizados en la industria de la electrónica, se han tratado de desarrollar nuevas tecnologías que no dependan de esos materiales, además se busca una armonía con la naturaleza. Es por ello, que la tendencia industrial es hacia la implementación de los Materiales Moleculares .

1.2 Objetivo General

Corregir y validar el Simulador de Propiedades Eléctricas y Ópticas de Materiales Moleculares (SPEOMM).

Realizar una aplicación de los Materiales Moleculares mediante un análisis del comportamiento eléctrico del material.

Justificar la necesidad de desarrollo de nuevas ideas de posibles aplicaciones de los Materiales Moleculares.

1.3 Objetivos Particulares

- Evaluar a partir de un programa en computadora diseñado para el presente fin, el comportamiento y las propiedades eléctricas en los Materiales Moleculares sintetizados.
- Determinar las propiedades ópticas en Materiales Moleculares que presenten propiedades acopladas.
- Encontrar una aplicación practica en los Materiales Moleculares semiconductores.
- Implementar el análisis de MM's mediante SPEOMM para el diseño de posibles aplicaciones.
- Realizar una aplicación en específico de manera que se puedan virtualizar los materiales y escoger el más adecuado para el problema en cuestión.

- Demostrar la capacidad de desarrollo así como las ventajas que poseen los Materiales Moleculares mediante el diseño de aplicaciones
- Manejo de sistemas de información avanzado para la toma de decisiones.

1.4 Metas

- Validar un programa en computadora que es capaz de calcular la resistencia y conductividad eléctrica en los materiales a diferentes temperaturas. El programa realiza gráficas del comportamiento eléctrico de los compuestos para con este, definir si los materiales sintetizados son conductores o semiconductores. Realiza el cálculo de la Energía de Activación Eléctrica para los mismos materiales. Por otro lado; el programa se encarga también de evaluar el comportamiento óptico de los compuestos, graficando porcentaje de transmitancia como una función de la longitud de onda y la variación del coeficiente de absorción con la energía del fotón, para finalmente evaluar la Energía de Activación Óptica y realizar la comparación con la Energía de Activación Eléctrica, que permita conocer el mecanismo de transporte de carga en los Materiales Moleculares.
- Evaluar el comportamiento y las propiedades eléctricas en los Materiales Moleculares sintetizados, a partir de la determinación de la relación entre la temperatura y la corriente eléctrica transportada en los compuestos. La variación de la conductividad eléctrica con la temperatura, es de gran significado físico para diferenciar entre conductores y semiconductores. Es necesario evaluar el comportamiento eléctrico de dichos compuestos con la temperatura, ya que pensando en "el modelo de Bandas" que explica satisfactoriamente el transporte de cargas eléctricas en Materiales Moleculares; la conductividad se incrementa con la temperatura en materiales semiconductores y disminuye con la temperatura en los conductores. Así, además de las medidas de conductividad en función de la temperatura, es posible realizar otro tipo de medidas como las de susceptibilidad magnética o las medidas de variaciones de la frecuencia de resonancia.
- Realizar la aplicación práctica de los Materiales Moleculares mediante la simulación del comportamiento eléctrico del Material Molecular en LabView®, para obtener un voltaje de respuesta por medio de una tarjeta de adquisición de datos NI/USB-DAQ, con la finalidad de aplicar dicho voltaje como entrada a un circuito físico que consta de un tanque de agua, un motor y una manguera. La velocidad del motor varía con respecto al voltaje de entrada, con lo que el agua que sale de la manguera varía de igual forma.

1.5 Estado del Arte

A nivel mundial el estudio de este tipo de materiales ha tenido bastante éxito, la clasificación de estos materiales se ha dividido en dos grupos orgánicos e inorgánicos. Muchas universidades de países como España, Estados Unidos y Francia investigan continuamente sobre nuevos materiales y su posible aplicación en el área de sistemas y electrónica principalmente.

Actualmente se ha producido una molécula basada en bacterias (rodopsina) que permite transmitir luz o ponerse opaca en dos estados, lo que lograría simular la lógica binaria y se puede pensar en el almacén de datos, así como sus lecturas por láser de luz roja y verde (frente a la cual actúan), este aspecto ha sido causa de estudio en la UCLA por el doctor James R. Heath y J.F. Stoddart. Además la velocidad de cambio de estado que puede asociarse a la velocidad de grabado o lectura es de diez billonésimas de segundo, aunque esto sucede solo a una temperatura bastante inferior a cero grados centígrados. Otro factor que mejoraría sería el espacio que requieren. La tendencia es claramente a desarrollar este tipo de moléculas en implementaciones electrónicas, ya que existen límites en la tecnología del silicio, porque a pequeña escala los componentes comienzan a funcionar de manera diferente.

El efecto de la baja temperatura está siendo tratado en los laboratorios de IBM, en donde se han logrado concentraciones de datos mayores ya que en vez de un bit por molécula, lograrían 1 bit por cada raya del espectro luminoso en cada molécula. Otras áreas de investigación muestran que los MM's tienen la capacidad de actuar en el organismo humano ya que no presentan ni rechazo ni contaminan el cuerpo. Alan J. Heeger fundó la Uniax Co. con la finalidad de buscar aplicaciones a los materiales moleculares de tipo polimérico que desarrolla.

Ejemplo de dispositivos electrónicos, ópticos y magnéticos que actualmente se desarrollan, son diodos, transistores, interconexiones, memorias, sensores, biosensores, emisores de luz, nanoimanes, dispositivos microelectromecánicos -MEMs, etc.

En México, el único lugar donde se realiza este tipo de investigación acerca de Materiales Moleculares, es en el Tecnológico de Monterrey, donde se han desarrollado nuevos materiales y se han caracterizado obteniendo información experimental de ellos. Actualmente se cuenta con investigaciones referentes a las propiedades ópticas y eléctricas de los Materiales Moleculares, se tienen tanto tablas y gráficos como la documentación de los hechos.

Por otro lado, también se ha desarrollado un software con el fin de analizar los datos obtenidos experimentalmente para poder realizar los análisis de manera más rápida y eficaz.

Capítulo 2 Antecedentes

2.1 Teoría de Materiales Moleculares

Desde los años 70's el estudio de los Materiales Moleculares orgánicos ha incrementado considerablemente, de tal forma que desde el descubrimiento de las sales superconductoras de Bechgaard se han conseguido materiales superconductores con temperaturas de transición por arriba de 12K.

Cuando se descubre un nuevo material molecular conductor y/o semiconductor, es indispensable realizar su caracterización y estudio, para ello se siguen diversas técnicas que se aplican a diferentes situaciones dependiendo de las características que se presenten.

Dentro de la caracterización de los materiales se encuentran las propiedades termoeléctricas y de conductividad de un material en función de variables específicas, tales como temperatura, presión, presencia de campo magnético y orientación de la estructura, también encontramos aspectos magnéticos y ópticos que son necesarios tomar en cuenta para describir específicamente un material molecular.

Con el fin de lograr las propiedades eléctricas y magnéticas deseables del metal orgánico, es necesario determinar la estructura cristalina del material, y establecer relación entre la estructura y las propiedades electrónicas. Para llevar a cabo este paso, se debe realizar un estudio redox (en el que un metal se reduce y el otro se oxida) en el material, por medio de una voltametría cíclica. Este estudio determina si se pueden lograr los iones radicales y estables que permitan la cristalización de las moléculas.

Para controlar la arquitectura supramolecular de los materiales, se han desarrollado dos técnicas principales.

- Películas de Langmuir-Blodgett (LB), ejerce control sobre la orientación de moléculas individuales, se exponen las películas en vapores de yodo (oxidación química) para desarrollar el estado de valencia mixta; el problema de esta técnica es que se generan multicapas de baja estabilidad que tienden a degradarse.
- Cristales Líquidos. Se obtienen nuevas formas de estructuras supramoleculares en los radicales Tetratifulvalenos (TTF) por medio de la mesofase.

Es complicado determinar con exactitud cuál será el comportamiento eléctrico del material, aunque se puede determinar qué necesitan para tener comportamiento electrónico. En cuanto a la estructura del material, se deben presentar apilamientos homogéneos y uniformes, también se sabe que es necesaria la existencia de un estado de valencia mixta en las moléculas de los apilamientos homogéneos.

Las ventajas de los Materiales Moleculares conductores son muchas, desde la ligereza hasta su alto control de impurezas y baja generación de calor; es por ello que existe una tendencia hacia la implementación industrial de estos materiales. Por otro lado, los superconductores orgánicos que se conocen en la actualidad tienen temperaturas críticas menores a las que presentan los superconductores cerámicos, sin embargo se pretende que en un futuro se alcancen temperaturas críticas mucho más elevadas. En la Figura 1, se puede observar una gráfica de las temperaturas críticas (T_c) de los materiales superconductores orgánicos y los cerámicos; como se puede ver, los materiales inorgánicos han tenido una etapa de desarrollo mucho más lenta a la tendencia que muestran los materiales orgánicos.

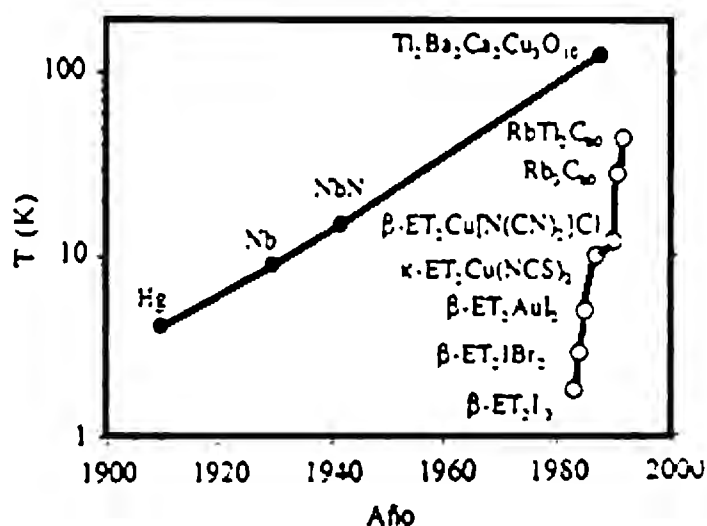


Figura 1. Curvas de T_c para metales cerámicos y orgánicos¹

Cuando se implementa más de una carga en una misma molécula, se puede generar un gran coste energético; repulsiones coulombiana (U), que ocasionan que la conductividad disminuya. Para lograr que sea estable se deslocaliza la carga, cargándolas positivamente.

Para determinar cómo elaborar Materiales Moleculares estables con propiedades de conductividad (materiales semiconductores, superconductores y metales), es necesario someter al material a una síntesis orgánica por medio de la cual se obtienen bloques moleculares; además se controlan las propiedades que permiten el transporte electrónico. Este transporte se logra por medio de bandas de energía que se forman en el material, el ancho de las bandas determina el grado de conductividad, debido a que a mayor movilidad de los portadores de carga existe una mayor conductividad, es importante que el ancho de banda sea mayor a las repulsiones coulombianas que se

¹ Carlos J Gómez García. Medida de las propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas en conductores moleculares Artículo de la Universidad de Valencia.

presentan en los electrones de conducción dentro de una molécula, de lo contrario se logra un comportamiento semiconductor.

Las moléculas que pasarán a formar parte del nuevo material, se escogen en base a un análisis previo de ciertas condiciones: que tengan orbitales que interactúen con el sólido para formar las bandas de energía; ser moléculas planas receptoras o dadoras de electrones con el propósito de ocupar las bandas formadas; y ser capaces de formar iones radicales estables.

Las moléculas se van apilando a unas distancias interplanares de las moléculas adyacentes, con lo que se consigue que se formen las bandas, dando a lugar un grado de transferencia que permite establecer la capacidad de conductividad del material. La conductividad resulta ser mayor en el sentido y dirección en el que surge el apilamiento de las moléculas, así mismo se puede lograr un cambio en el comportamiento conductor, a temperaturas bajas cambia la fase de conductor a semiconductor o incluso hasta llegar a ser aislante, este fenómeno se le llama distorsión de Peierls, la cual provoca un desdoblamiento de la banda semiocupada en dos: una completamente llena y la otra vacía. A este cambio energético se asocia una distorsión estructural por lo que el compuesto pierde su apilamiento regular². Se puede evitar esta distorsión por medio de moléculas que constan de orbitales capaces de interactuar con el sólido en cualquier sentido, eliminando la inestabilidad en las sales del material cristalino ocasionando un efecto contrario en el material, a bajas temperaturas se logra la superconductividad.

El hecho por el cual se utilizan diversas técnicas para la caracterización de Materiales Moleculares, es que no siempre se obtienen monocristales aptos para analizarlos mediante difracción de rayos X; sin embargo aunque se pueda llevar a cabo la difracción de rayos X, normalmente se utilizan otras técnicas como la resonancia paramagnética electrónica (EPR), las espectroscopías UV-VIS, IR y Raman, las medidas de susceptibilidad magnética estática y de magnetización, etc., que a continuación se explicarán.

2.1.1 Medidas de conductividad eléctrica

La mayoría de los materiales orgánicos presentan transiciones metal-semiconductoras, metal-aislante, semiconductor-aislante o metal-superconductor. Esto determina el comportamiento eléctrico en función de la temperatura; la estructura molecular del material es la responsable de que se comporte como metal, semiconductor, aislante o superconductor. Es importante realizar este estudio para los materiales estudiados porque se puede determinar las temperaturas de transición y aprovechar el comportamiento del material en cada uno de los rangos de temperaturas de operación.

Esta técnica se realiza utilizando el método de 4 puntos con: cables de oro o platino de 10-50 micrómetros de diámetro, suministrando una fuente de alimentación continua de

² Angulo Concepción Rovira. Conductores y Superconductores Moleculares. Artículo. CSIC.

un microampere para evitar que los cristales se puedan calentar. Si los materiales se calientan se producen microfisuras que anulan la ley de Ohm, por lo que se lleva a cabo un control en su temperatura. Dependiendo de la morfología del cristal se usa una configuración diferente para determinar la conductividad eléctrica del material, aunque el esquema resumido de los procesos se puede ver en la Figura 2.

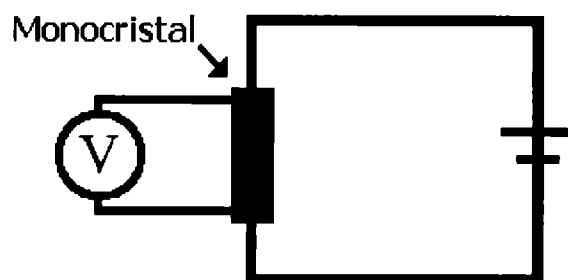


Figura 2. Montaje para determinar la conductividad eléctrica

La Figura 2 muestra cómo se aplica una diferencia de potencial a una estructura para poder leer su comportamiento de conductividad eléctrica.

Para realizar un estudio sobre el cambio de la conductividad, con respecto de la temperatura, se tienen que tomar en cuenta dos propiedades de los materiales en comparación con los metales clásicos, una es la anisotropía de los Materiales Moleculares y la otra es la conductividad a temperatura ambiente, siendo esta mayor en los metales clásicos. Los conductores orgánicos pueden ser clasificados como metales con menos densidad de portadores y menores movilidades que los metales clásicos.

Para los materiales orgánicos la conductividad puede determinar el comportamiento de la muestra, tal y como se puede observar en la Tabla 1.

Tabla 1. Conductividad eléctrica en función del material

Rango de conductividad	Tipo de material
$\Sigma < 10^{-10} \text{Scm}^{-1}$	Aislante
$10^{-10} \text{Scm}^{-1} < \sigma < 10^0 \text{Scm}^{-1}$	Semiconductor
$\Sigma > 10^0 \text{Scm}^{-1}$	Metal

Si en el sólido obtenido aumenta la conductividad al disminuir la temperatura, cuando se somete al material a una temperatura de transición, se convierte en material aislante, y a menores temperaturas se comporta como un superconductor, entonces se puede clasificar al sólido como un metal orgánico. Si la conductividad disminuye a menores temperaturas, entonces se trata de un material semiconductor.

En la Figura 3, se grafica el comportamiento de la resistividad cuando varía la temperatura, para determinar la conductividad del material a una temperatura de operación determinada.

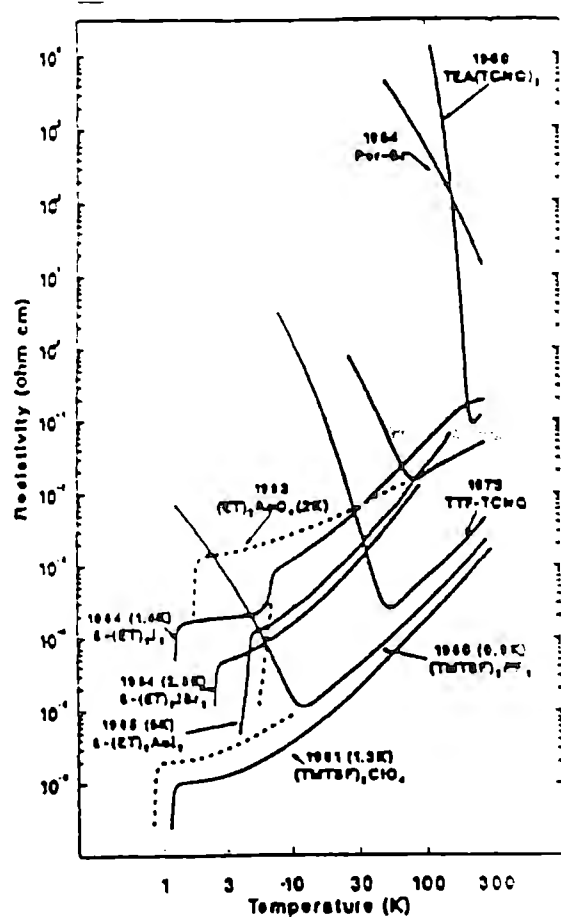


Figura 3. Gráfico de temperatura vs. conducción³

Otra característica que se puede obtener realizando una prueba de conductividad además de la anisotropía del material es la dimensionalidad eléctrica.

Si la muestra resulta ser metal-superconductor, entonces también se pueden realizar otras pruebas para determinar la temperatura crítica, ya que esta puede variar, para ello se llevan a cabo las medidas de susceptibilidad magnética tanto en AC como en DC, siendo las primeras las que dan T_c; otros métodos para obtener T_c, son las medidas de variación de frecuencia, en las que se ve un cambio frecuencial en T_c y finalmente las medidas del efecto Meissner, el cual se basa en la propiedad de los materiales a repeler el campo magnético a temperaturas inferiores a T_c.

Dentro de las variables que pueden servir para realizar un estudio mas completo sobre la conductividad, están: la presencia de campo magnético, la presencia de presión en

³ Concepción Rovira Angulo. Conductores y Superconductores Moleculares. Artículo. CSIC.

los materiales y las medidas de poder termoeléctrico, en esta última variable, existen varios efectos a analizar, como son el Seebeck que implica un aumento de potencial por gradiente de temperatura, el efecto Peltier, en donde el flujo de corriente genera un gradiente de temperaturas y el efecto Hall que se basa en la teoría magnética

2.1.2 Medidas de espectroscopía resonancia paramagnética (EPR):

Esta técnica se utiliza por muchas razones, dentro de las más importantes es el tamaño de muestra a analizar (que es del mismo tamaño que rayos X) y el tiempo que tarda en realizarse una prueba de estas (1 o 2 días). En EPR existen dos experimentos, uno consiste en la rotación de la muestra a una temperatura constante y el otro dejando el material fijo pero variando la temperatura. Esta técnica solo proporciona información sobre la sal radical, salvo en casos raros o que el anión sea paramagnético. Los parámetros a estudiar en un EPR son la anchura de la señal mediante picos, en donde se obtiene la estructura de la red orgánica radical, el factor g que está determinado por la posición de la señal el cual no indica nada sobre la fase cristalina y la variación térmica de la susceptibilidad de spin, la cual permite determinar la susceptibilidad relativa, su estudio en función de la temperatura permite obtener información sobre el comportamiento magnético de los electrones.

2.1.3 Medidas de susceptibilidad magnética estática:

No se usa mucho en conductores orgánicos ya que presentan aniones diamagnéticos la mayoría de ellos, por ello suele aplicarse en Materiales Moleculares metálicos. Los materiales que presentan una propiedad diamagnética, es debido a que el material repele los campos magnéticos, por consiguiente presentan una conducción magnética pobre; el fenómeno sucede por la circulación de electrones en orbitales doblemente ocupados, los materiales tienden a moverse hacia donde exista una menor fuerza magnética.

Esta técnica requiere grandes cantidades de material (10 mg) aunque no necesitan que sean muestras monocristalinas. Las medidas de magnetismo estático se obtienen mediante susceptómetros SQUID, los cuales se basan en la física cuántica para su funcionamiento; los susceptómetros dan medida de la inandad, que es proporcional al campo magnético.

Las sales conductoras que sufren una transición a una fase superconductoras presentan una disminución en la susceptibilidad a medida que se acercan a la T_c . Cuando se alcanza la T_c la susceptibilidad decrece de manera brusca ya que la fase superconductoras es diamagnética.⁴

⁴ Carlos J Gómez García Medida de las propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas en conductores moleculares Artículo de la Universidad de Valencia.

2.1.4 Espectroscopías ópticas: UV-vis, IR y Raman:

Con estas técnicas se puede obtener una descripción sobre las transiciones electrónicas, así como los modos vibracionales de los radicales orgánicos y de los aniones que forman las sales radicales. La espectroscopía de Raman determina la ionicidad de las moléculas del radical orgánico.

La Espectroscopía UV-vis se realiza en pastillas de bromuro de potasio (KBr) prensadas o en emulsiones de un sólido solvente que no reaccione con la muestra. En base a un análisis de bandas es posible determinar que tan buen conductor es el material.

La técnica de Espectroscopía IR, nos proporciona información sobre las bandas y sobre el anión a utilizar, esta técnica puede realizarse en monocristales o siguiendo la misma técnica que en UV-vis.

Finalmente la técnica de espectroscopía de Raman, nos dice información similar a IR, esta se realiza con un láser de baja potencia para no quemar la muestra.

Los metales sintéticos, también denominados orgánicos, pueden ser clasificados de la forma que se presenta en la Figura 4.

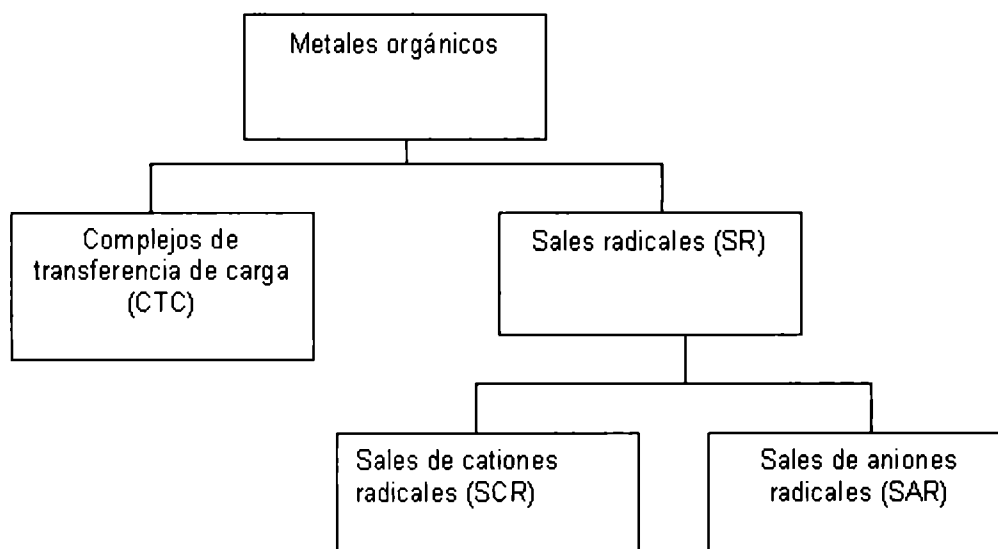


Figura 4. Clasificación de los materiales sintéticos

Los CTC se forman por dadores y aceptores alternados de manera que se produce una transferencia de carga entre ellos, por otro lado las sales radicales están formadas por un radical orgánico ya sean cationes o aniones y su contraión respectivo.

De las SR, las más estudiadas son las SCR, que cuentan con un radical orgánico que por lo regular suele ser tetratíafulvaleno (TTF) o cualquiera de sus derivados y su contraión, el cual determina las propiedades estructurales, eléctricas y magnéticas del material. En los sólidos moleculares de iónico-radicales (SIR), existe sólo una molécula ya sea aceptora o dadora que logra establecer los iones radicales, y para lograr una neutralidad en el sólido se implementa un contraión inorgánico, el cual influye en la estructura del sólido molecular.

Los sólidos de carácter CTC de manera natural, se dan con las moléculas dadoras yceptoras en una fila apiladas de manera alterna, y esto resulta en un material aislante; se puede lograr un comportamiento metálico si en su estructura se forman dos pilas separadas con un espaciado uniforme, una de electrones aceptores y la otra de electrones dadores. Es importante que la transferencia de carga entre las moléculas sea parcial, ya que si las moléculas dadoras ceden por completo el electrón a las moléculasceptoras, se origina un material aislante, es por esta razón, que los dadores electrónicos muy buenos o los aceptores que son muy fuertes, no sirven para formar materiales conductores. El grado de transferencia de carga, se puede obtener mediante un estudio de voltametría cíclica.

Hay que remarcar, que si el material cumple con ambas condiciones mencionadas anteriormente, hay una probabilidad alta de conseguir el comportamiento metálico, sin embargo no es una afirmación total. Para realizar los estudios de las propiedades de estos sólidos, es necesario obtener una muestra en forma de monocristal, a partir de una mezcla de la solución saturada del dador con la solución saturada del aceptor a una temperatura alta, y luego dejar enfriar lentamente.

Las bandas formadas en los Materiales Moleculares de tipo CTC, se denominan HOMO y LUMO; si dichas bandas son capaces de permitir el solapamiento se genera una banda parcialmente ocupada, que significa que existe una conductividad, si la estructura cristalina es la adecuada. Sin embargo, los huecos existentes en la molécula se encuentran en el orden de varios eV (electro-volts), y la anchura de las bandas en el orden de meV (mili electro-volts), por lo que son materiales difíciles de fabricar. Dichas bandas es posible de conseguir sustrayendo electrones de la banda HOMO, lo que se denomina oxidación; y al mismo tiempo, la adición de electrones en la banda LUMO, con lo que se le agregan electrones, y provoca una reducción. Es importante considerar que el potencial de ionización (PI) de la molécula dadora debe ser bajo para alcanzar el estado estable. Los valores del PI de los componentes, que se integran en la formación de conductores orgánicos, deben encontrarse entre los valores de 6.3 y 6.9 eV, también se sabe que resulta más fácil realizarle estudios al material, como voltametría cíclica, cuando los valores de los potenciales redox son de igual forma bajos. La estabilidad del catión radical planos debe ser cinética y termodinámica; el tetratíafulvaleno (TTF) contiene cationes radicales altamente estabilizados.

Debido a que el tetratíafulvaleno, es el radical orgánico más utilizado al igual que sus derivados, merece se conozca más sobre sus propiedades.

La configuración de la Figura 5, corresponde al TTF, este componente en conjunto con un aceptor electrónico, tetracianoquinodimetano (TCNQ), que se puede observar en la Figura 6, forma un CTC con características metálicas. Este compuesto resulta ser inestable a bajas temperaturas debido a la transición de metal aislante (distorsión de Peierls).

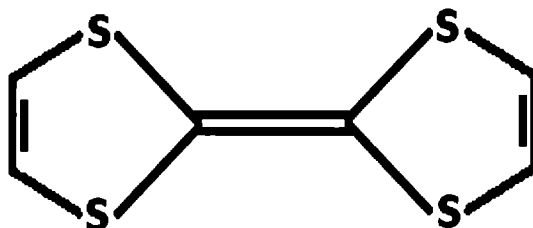


Figura 5. Tetratiafulvaleno (TTF)



Figura 6. Tetracianoquinodimetano (TCNQ)

Este compuesto se ha tomado como prueba para lograr la estabilidad y conductividad de los CTC, las soluciones establecidas son:

- Sustituir los átomos de S por átomos de Se o Te.
- Agregar heteroátomos de O, S, Se y Te, en la periferia. Este método ha logrado mayor estabilidad en los estados oxidados ya que se reducen los potenciales de oxidación, disminuir las repulsiones coulombianas y aumentar las dimensiones de los materiales debido a la multiplicación de las interacciones entre los orbitales.
- Sustituir la unión C=C central por espaciadores mayores.

Otra forma para incrementar las dimensiones en los sólidos de CTC, es la implementación de los puentes de Hidrógeno, que ocasionan mayor interacción entre moléculas adyacentes.

Los enlaces Van der Waals presentan propiedades específicas en los materiales, ya que la energía de la capa de enlace es menor que la presente en enlaces covalentes o iónicos de cristales atómicos, lo cual permite libertad de movimiento en los átomos, generando así diversas propiedades ópticas, eléctricas y mecánicas. Los Materiales Moleculares constan de unidades moleculares individualmente sintetizadas, caracterizadas y organizadas en una fase de condensación. Las unidades moleculares presentes en los materiales son especies orgánicas, organometálicas o metal-orgánicas obtenidas por condensación, las cuales son caracterizadas por su naturaleza química, potenciales redox, orbitales más altos ocupados y más bajos desocupados (HOMO, LUMO), carácter dipolar o multipolar y polarizabilidad, entre otras. A causa de

su verdadera naturaleza, las propiedades de los Materiales Moleculares como potencial de ionización, afinidad electrónica y polarizabilidad, pueden ser derivadas de las características de las unidades moleculares que los integran; es por ello que resulta fundamental su caracterización.

Los Materiales Moleculares presentan una estructura química muy especial, ya que gracias a los apilamientos regulares se genera direccionalidad en el material, logrando así direcciones preferenciales para la conductividad (aunque en los materiales amorfos no hay cambios significativos en sus propiedades eléctricas, con respecto a los otros dos tipos de Materiales Moleculares); debido al hecho comentado, estos materiales suelen ser llamados sólidos casi unidimensionales o materiales de cadenas lineales de baja dimensión. Los Materiales Moleculares son de naturaleza orgánica, incluyendo desde moléculas de pequeño tamaño (10 átomos) hasta polímeros (macromoléculas), y son capaces de responder a estímulos eléctricos y luminosos de forma similar a los conductores y semiconductores inorgánicos.

La industria electrónica ha visto desarrollos muy importantes en cuanto a la fabricación e implementación de elementos electrónicos en los últimos cuarenta años, dando lugar a la implementación del silicio como principal elemento de los componentes eléctricos, sin embargo, el desempeño del silicio tiene límites operativos, por lo que resulta necesario optar por la implementación de Materiales Moleculares que pueden llegar a cubrir los huecos que deja el silicio.

Durante el desarrollo y estudio de este tipo de materiales se invierte mucho tiempo en el análisis exhaustivo de datos. Esto tiene un efecto negativo en la investigación debido a que se alargan los periodos de estudio de un material en particular, además de la evidente sub-utilización del recurso humano representado por los expertos en la materia.

La posibilidad de producir componentes electrónicos formados por moléculas orgánicas individuales, permitirá la reducción del tamaño de las computadoras y otros sistemas electrónicos, además también aumentara la velocidad de transmisión de la información. Muchos de estos Materiales Moleculares orgánicos y polímeros son de fácil acceso por síntesis orgánica convencional.

Por otro lado, el desarrollo de las Tecnologías de Información puede y debe ser utilizado para relevar al humano de las labores repetitivas y mecanizadas que no repercutan en el desarrollo de la persona que las realiza; automatizando estos procesos, no sólo se disminuye la duración de una investigación, sino que se da la posibilidad a los expertos en la materia, de ocupar su tiempo en cuestiones de mayor complejidad para las cuales su trabajo intelectual sea irremplazable.

2.2 Componentes del Simulador

SPEOMM (Simulador de Propiedades Eléctricas y Ópticas de Materiales Moleculares) es un software computacional que proporciona la facilidad de analizar las diferentes propiedades de los Materiales Moleculares. Cuenta con tres módulos y cada módulo contiene dos secciones: escritorio y tablas.

2.2.1 Módulo Eléctrico

El primer módulo, Figura 7, es el de la sección eléctrica, en el cual se obtienen las gráficas de corriente contra temperatura, conductividad contra temperatura y logaritmo natural de la corriente contra inverso de la temperatura, además, permite calcular la energía de activación eléctrica del sistema a un punto específico.

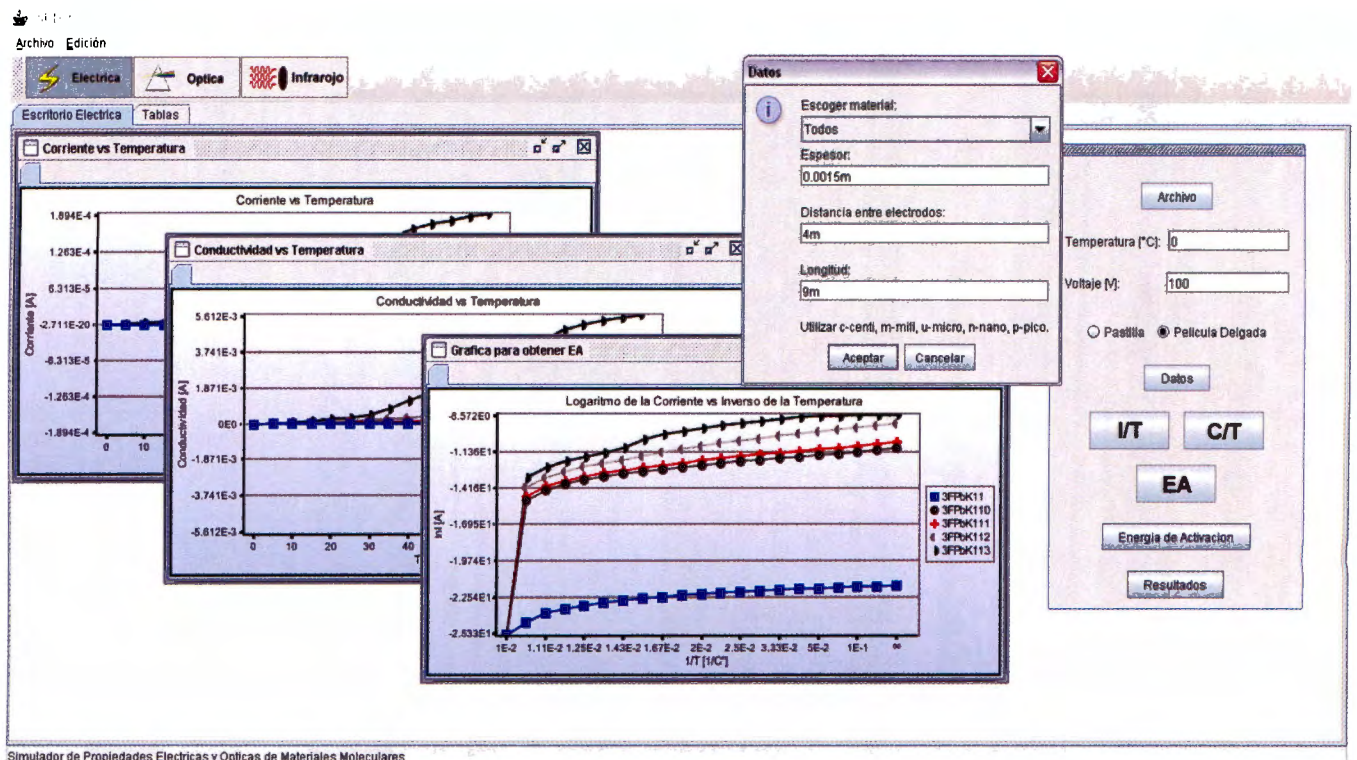


Figura 7. Escritorio del módulo de eléctrica

2.2.2 Módulo Óptico

El segundo módulo que contiene el software es el de la sección óptica, Figura 8, el cual nos permite calcular los gráficos de transmitancia contra longitud de onda y coeficiente de absorción contra energía del fotón, además permite calcular la energía de activación y la banda prohibida.

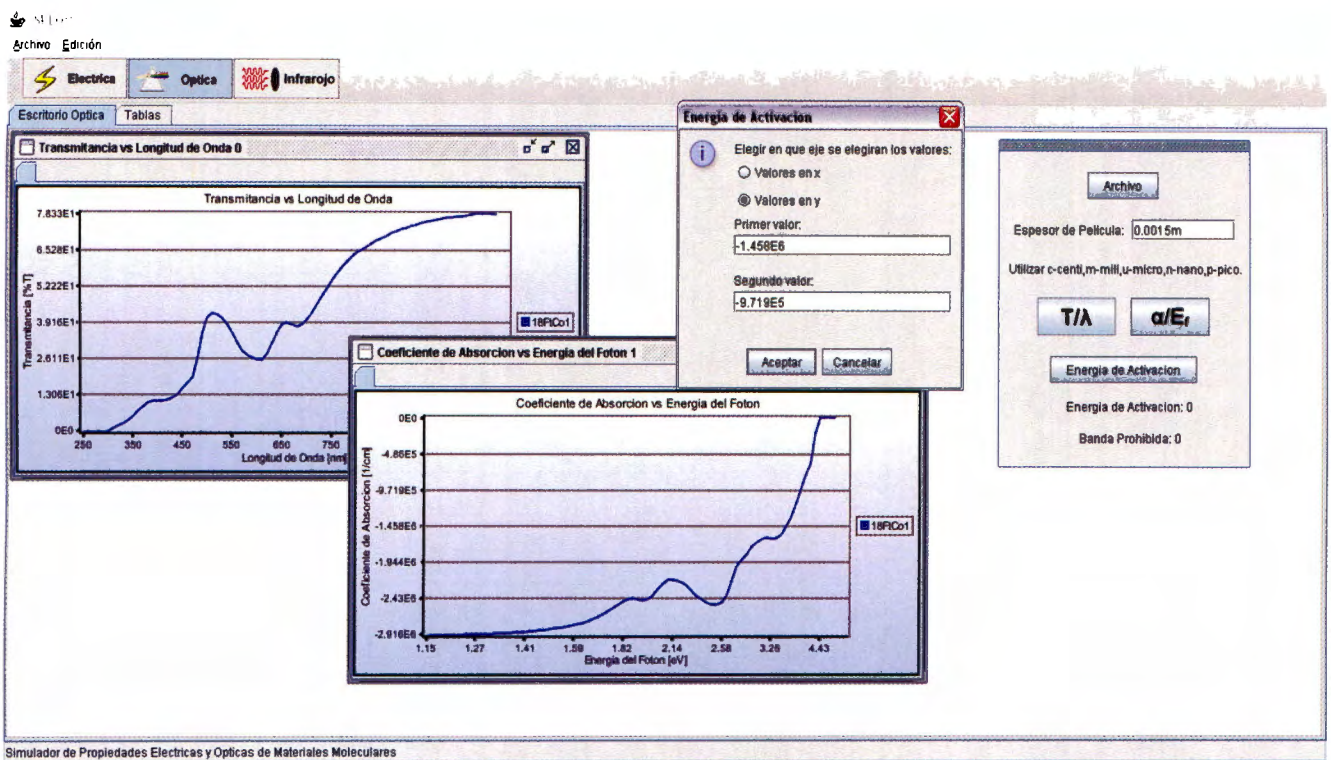


Figura 8. Escritorio del módulo de óptica

2.2.3 Módulo IR

Por último, el tercer módulo es el referente a espectroscopía IR. En este módulo, mostrado en la Figura 9, se analizan los componentes que contiene un material. Permite realizar una comparación entre un producto y sus materias primas para observar si se trata de un nuevo material o de la replica de una de las materias primas. También se puede obtener la comparación de las características de un mismo producto al someterse a diferentes procesos, por medio de la opción de degradación de dos productos. La última opción que tiene este módulo permite calcular una longitud de onda específica en un material.

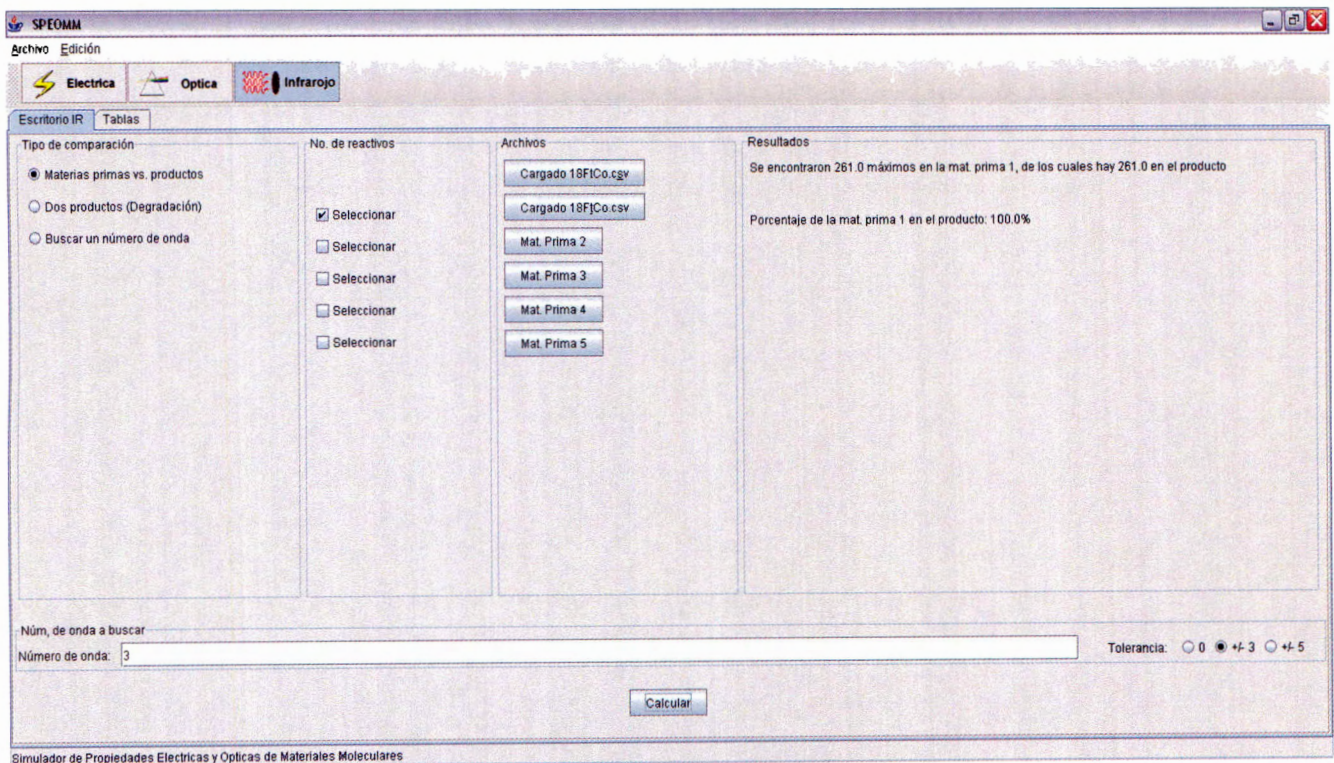


Figura 9. Escritorio del módulo de IR

Capítulo 3 Construcción del sistema de ayuda

Un tutorial sirve de ayuda al usuario para aprender a usar el software, es indispensable que el programa sea amigable, además se debe comprender su utilidad y funcionamiento, para poder operarlo y tener resultados confiables. Un tutorial no es más que el elemento integrador encargado de unir al usuario con el software de tal manera que las dudas que puedan surgirle al usuario sobre la operación del software sean en lo más posible nulas. Los tutoriales deben contener información relevante, imágenes explicativas, ir paso a paso e implementar un lenguaje apropiado para que el usuario se sienta cómodo mientras lee el tutorial, además es importante que mientras se va siguiendo paso a paso el tutorial, no se tenga que cerrar la ventana del tutorial.

En el ANEXO 3, se muestran las diferentes imágenes que se realizaron para la elaboración de los tutoriales, el objetivo de ellos es que cualquier persona pueda manejar el programa con facilidad si cuenta con conocimientos básicos del área de materiales.

El menú de Ayuda y los botones de Adelante, Atrás y Cerrar, se realizaron en Java®, mientras que los diseños de los tutoriales se hicieron en Photoshop®, con la finalidad de obtener una mejor calidad de imagen. En la Figura 10 se muestra el diagrama esquemático con las secciones que contiene el módulo de Ayuda.

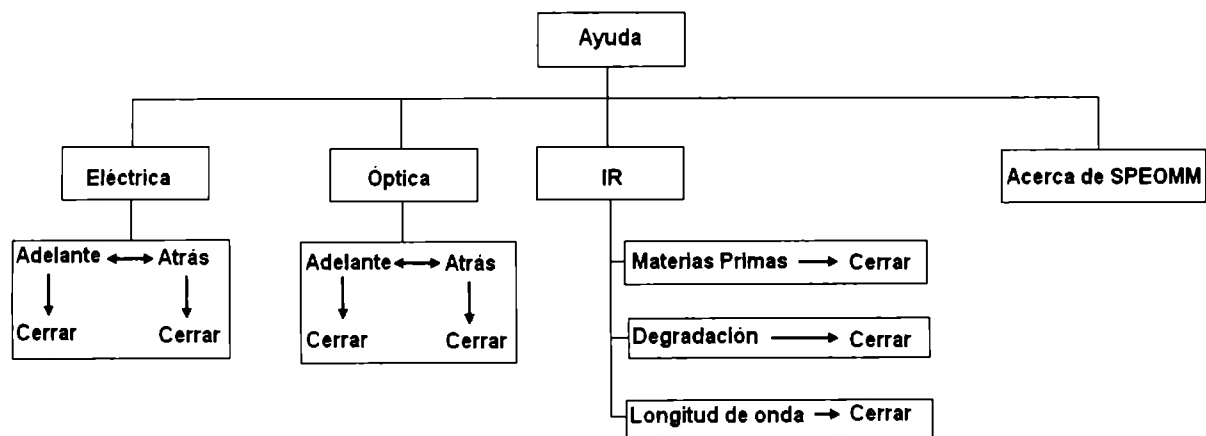


Figura 10. Diagrama esquemático del sistema de ayuda de SPEOMM

Capítulo 4

Validación y corrección de SPEOMM

La validación del software es importante para garantizar la confiabilidad que pueden tener los usuarios en el análisis de las propiedades de los Materiales Moleculares. Para realizar la validación se obtuvieron las diferentes gráficas y datos que proporciona SPEOMM a partir de los archivos generados por el equipo con el cual se analizan las propiedades.

4.1 Validación Eléctrica

Para la validación del escritorio de eléctrica se ocuparon los siguientes materiales: 3FPbK11, 3FPbK12, 3FPbK13, 3FPbK14, 3FPbK15, 3FPbK16, 3FPbK17, 3FPbK18, 3FPbK19, 3FPbK110, 3FPbK111, 3FPbK112, 3FPbK113 y 3FPbK114 (ver ÍNDICE DE MATERIALES MOLECULARES). Existen dos tipos de forma de materiales que se pueden analizar con el software: pastilla y película. Para todos los materiales analizados se determinaron los mismos datos solicitados por el programa para calcular las gráficas de corriente contra temperatura, conductividad contra temperatura, y logaritmo natural de la corriente contra inverso de la temperatura. La comparación se realizó con el programa de MS Excel® utilizando los datos de temperatura y corriente que el archivo de cada material contiene, y por medio de fórmulas dependiendo de la forma a analizar, se obtuvieron los demás datos necesarios para realizar las gráficas.

- Pastilla. Se propusieron materiales en forma de pastilla con un diámetro de 13 mm, la distancia entre electrodos de 4 mm, y el espesor de 2 mm. Las fórmulas utilizadas para poder realizar la comprobación en MS EXCEL® son:

$$R = \frac{V}{I} \quad \text{ec. [1]}$$

$$\sigma = \frac{w}{Rtd} \quad \text{ec. [2]}$$

Donde:

R	resistencia [Ω]
V	voltaje ⁵ [V]
I	corriente [A]
σ	conductividad [S/cm=1/(Ω cm)]
w	distancia entre electrodos [mm]
t	espesor [mm]
d	longitud de la pastilla [mm]

Cabe mencionar que dichas expresiones matemáticas se encuentran dentro del programa de SPEOMM realizando los cálculos de manera automática al solicitar las gráficas.

⁵ El voltaje en ambos casos se determinó a 100V.

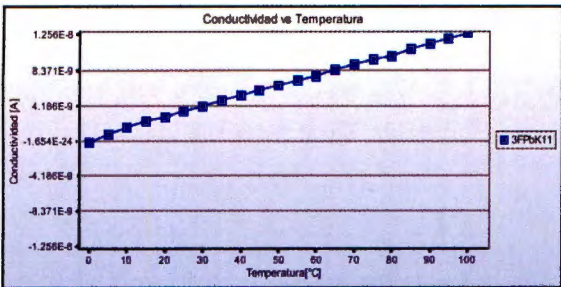
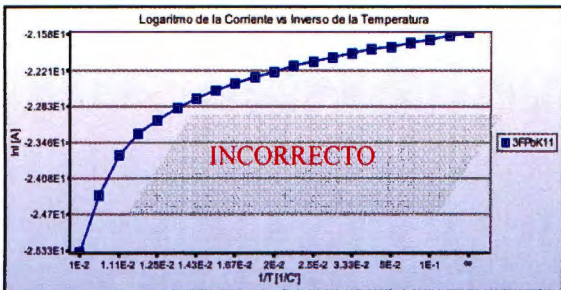
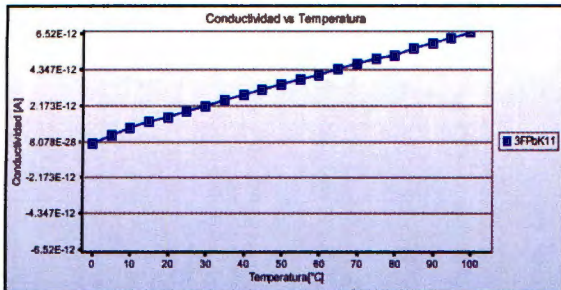
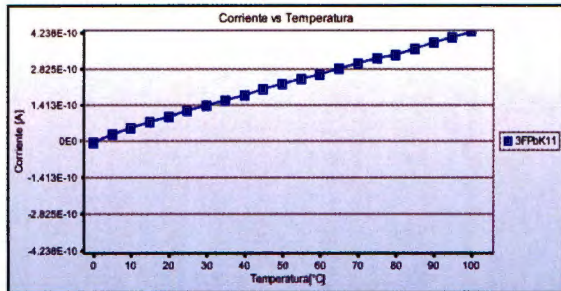
- Película. Se propusieron materiales en forma de películas, con una longitud de 9mm, la distancia entre electrodos de 4 mm, y el espesor de la película de 15000 Å (0.0015 mm)⁶. De igual forma que en el caso de pastillas, el programa SPEOMM realiza de manera automática los cálculos matemáticos para obtener los datos necesarios para la realización de las gráficas. Debido a que en las gráficas los únicos cálculos que varían entre película y pastilla dentro de un mismo material es para la conductividad, la comparación con MS EXCEL® sólo se realizó con la gráfica y el cálculo de conductividad en la parte de película. la fórmula es la misma que en el caso anterior, cambiando únicamente el diámetro de la pastilla por la longitud de la película.

Los resultados obtenidos de esta primera parte se muestran en las Figuras 11 a 24 (ver ANEXO 1 para consultar las tablas); las gráficas de conductividad obtenidas por MS EXCEL® se calcularon en base a los datos en metros, por lo que la diferencia entre SPEOMM y MS EXCEL® en esta parte es únicamente de unidades.

En las gráficas de las Figuras 11 a 24 se puede observar un error encontrado en el programa de SPEOMM, en la gráfica de logaritmo natural de la corriente contra el inverso de la temperatura, ya que los datos del valor mas chico del eje "x" con el valor mas chico del eje "y" son los que se muestran graficados, y así sucesivamente, resultando un cambio en la pendiente de la gráfica. Sin embargo, el cálculo de la energía de activación que realiza el programa de SPEOMM está correcto debido a que los cálculos se hacen utilizando los datos que se generan de manera interna en el software. Más adelante se mostrarán las correcciones realizadas a esta gráfica.

⁶ 1Å=0.0000000001m

SPEOMM



MS EXCEL®

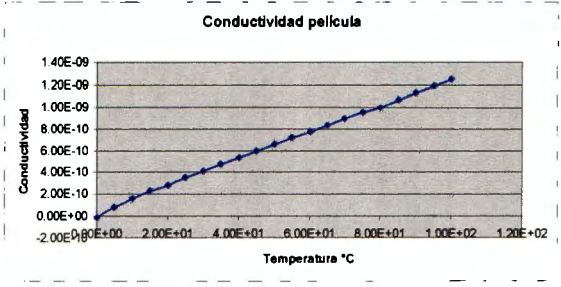
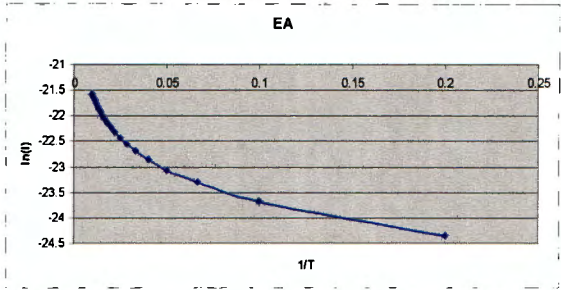
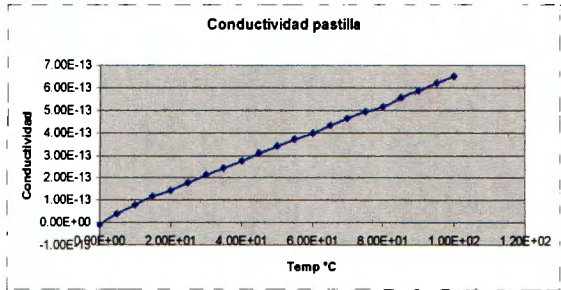
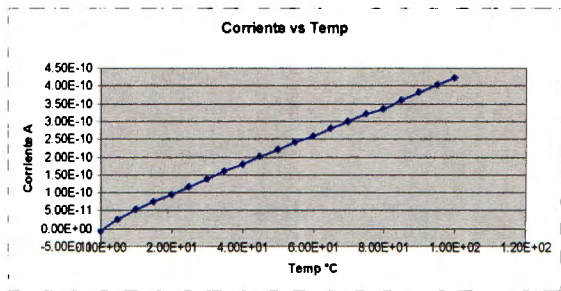


Figura 11. Comparación del material 3FPBK11

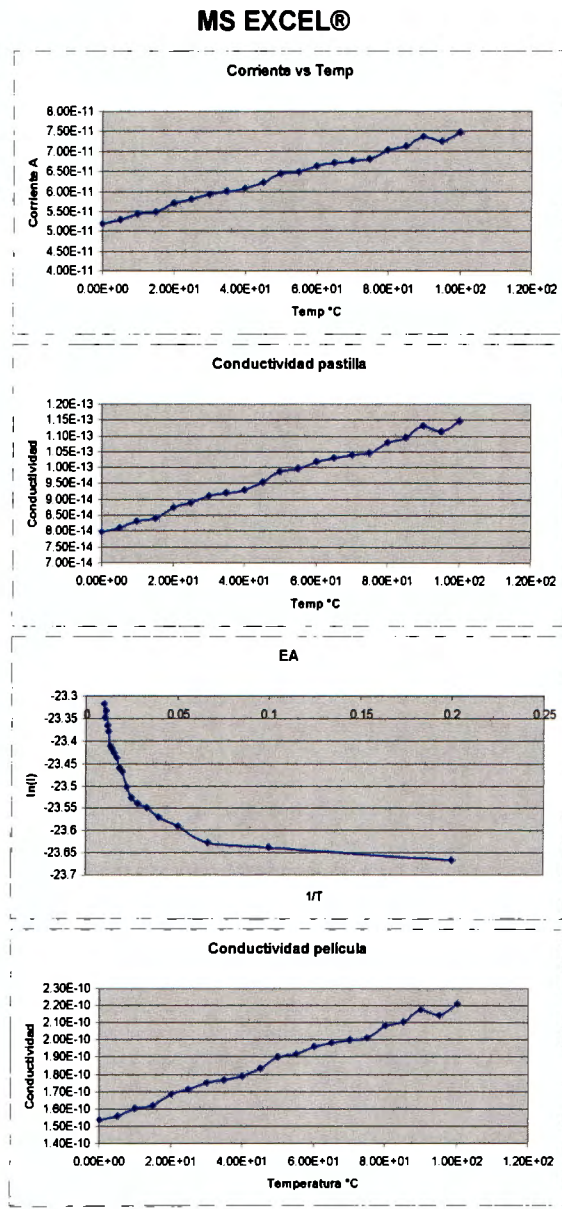
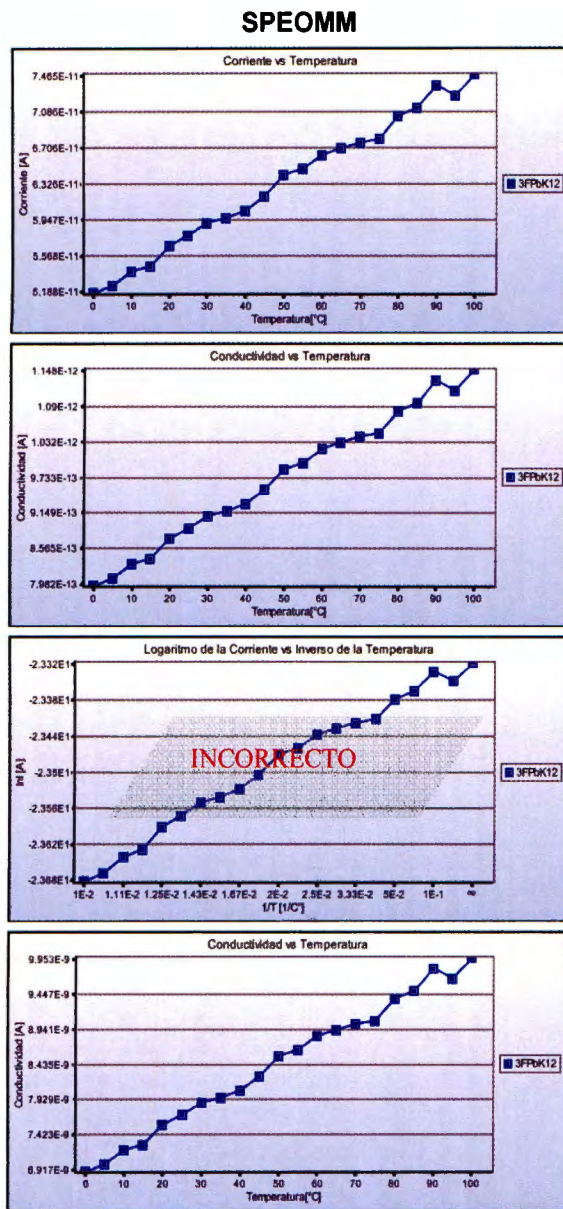


Figura12. Comparación del material 3FPBK12

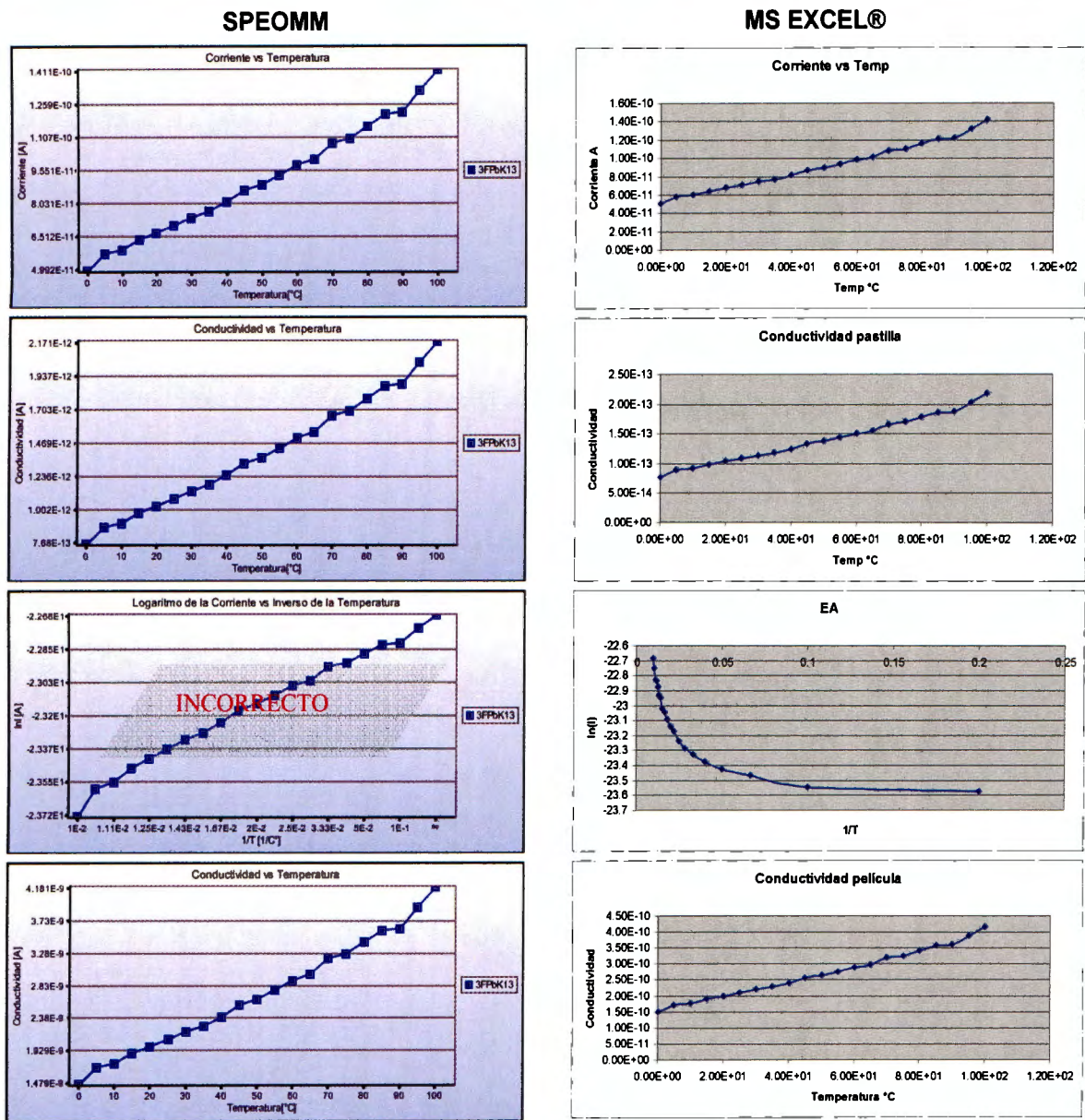
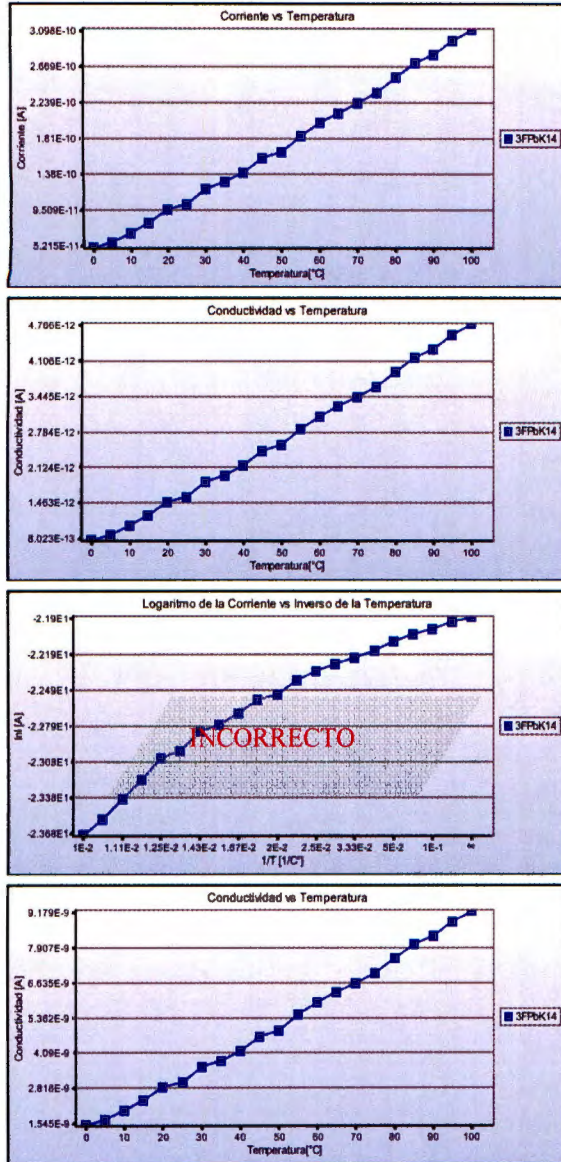


Figura 13. Comparación del material 3FPBK13

SPEOMM



MS EXCEL®

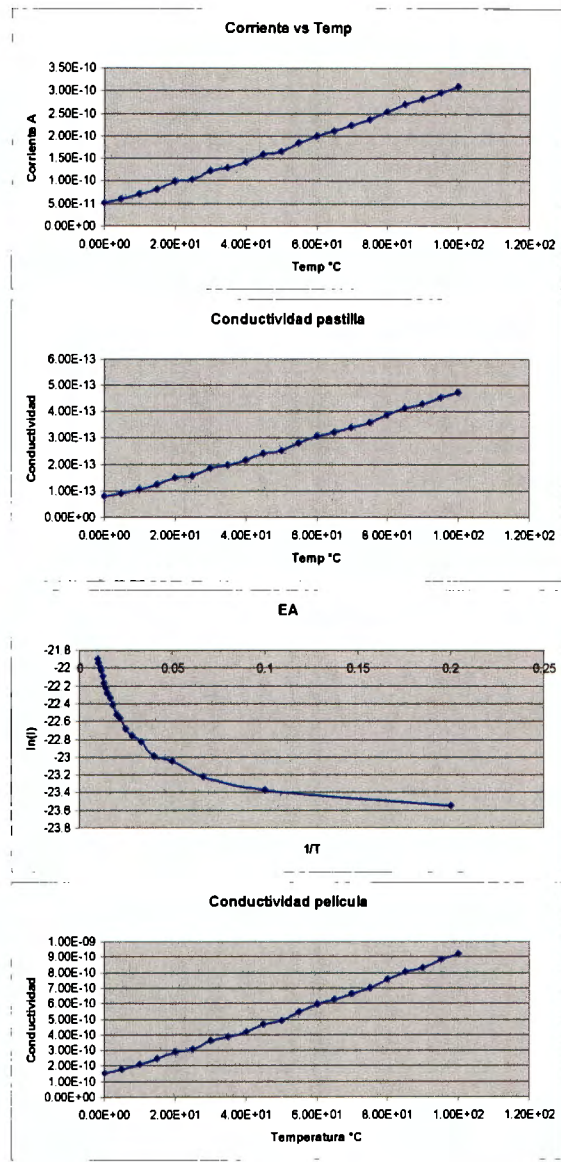
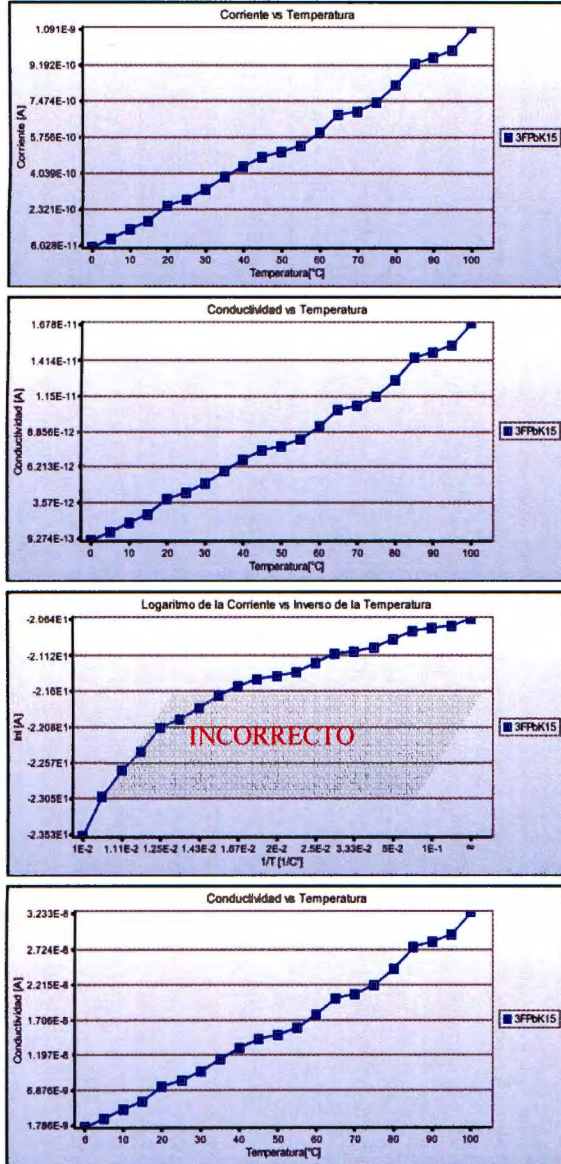


Figura 14. Comparación del material 3FPBK14

SPEOMM



MS EXCEL®

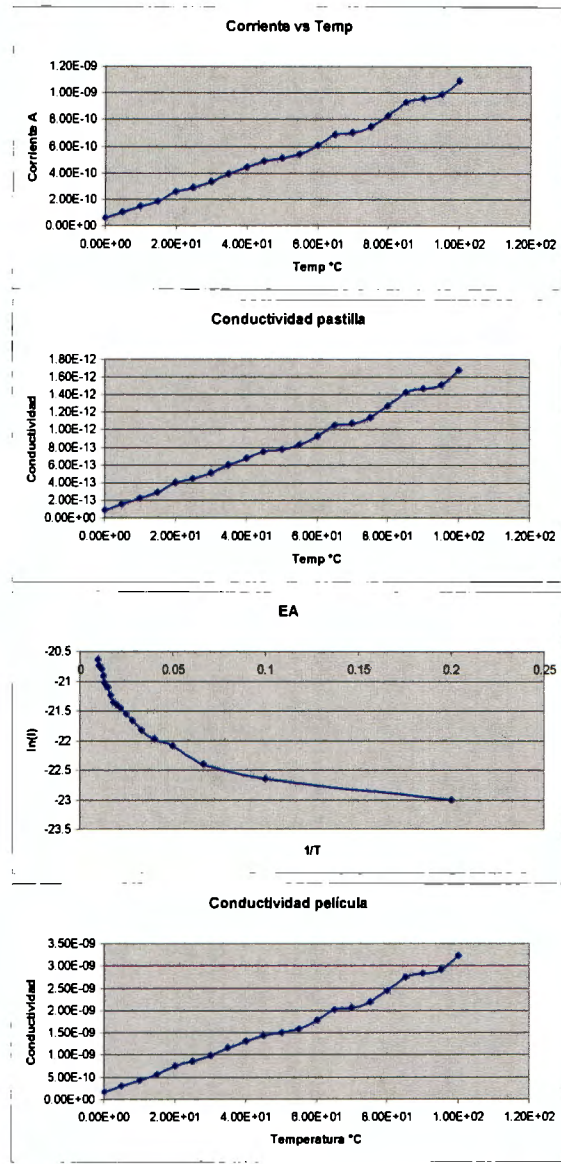
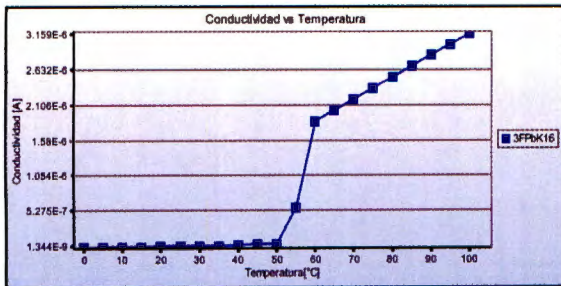
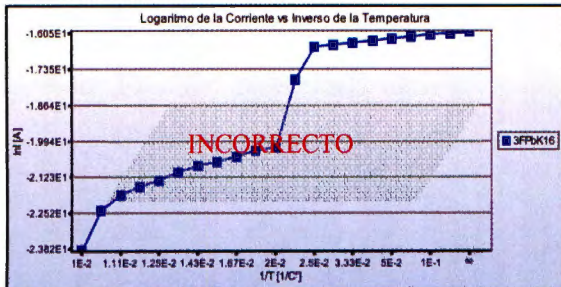
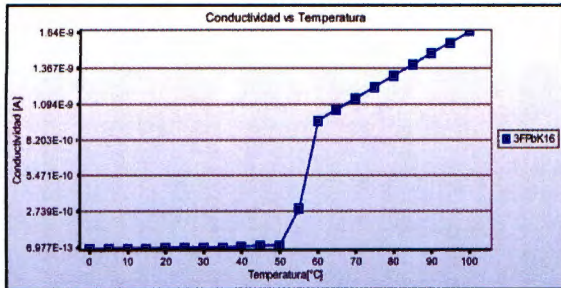
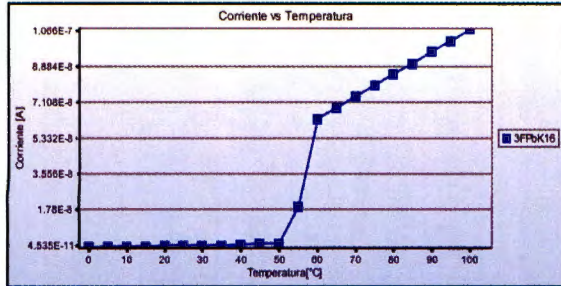


Figura 15. Comparación del material 3FPBK15

SPEOMM



MS EXCEL®

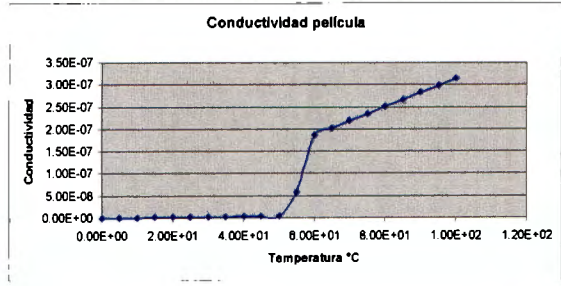
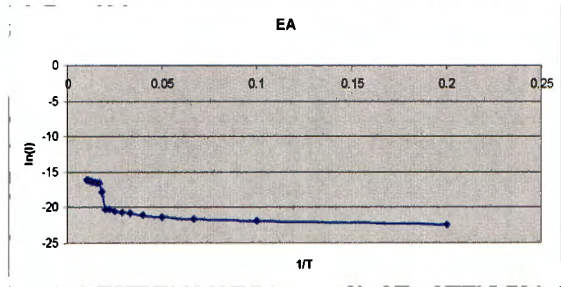
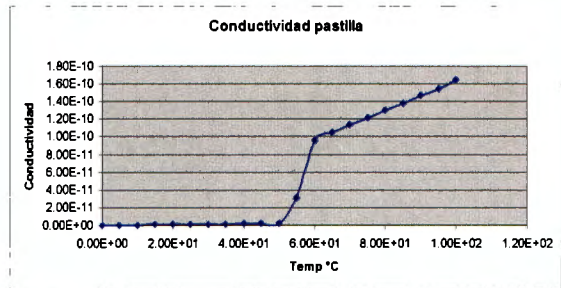
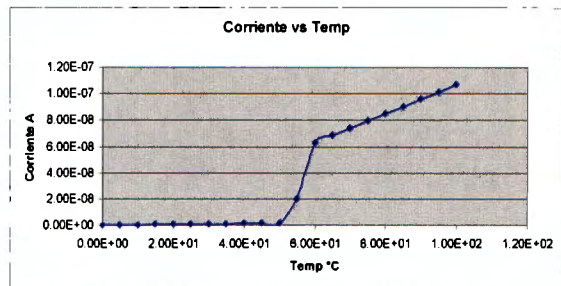
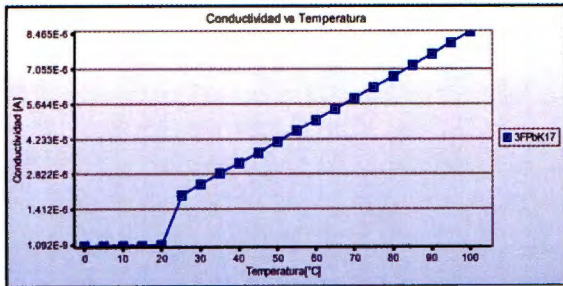
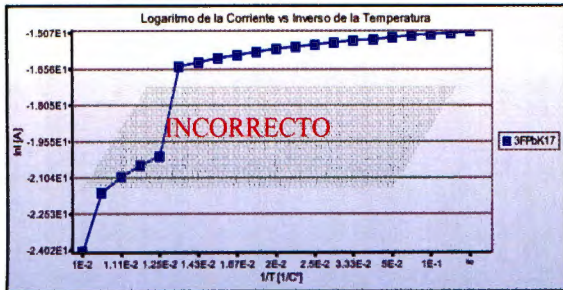
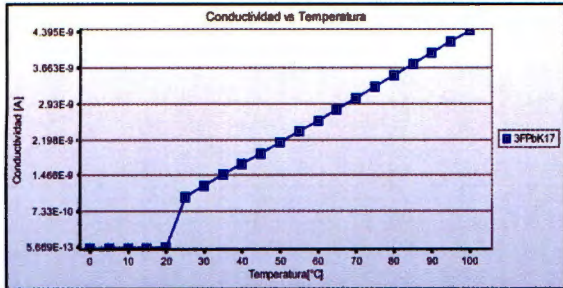
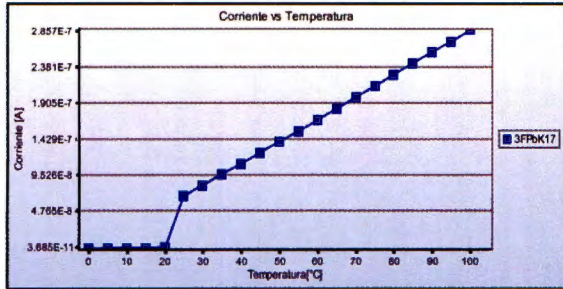


Figura 16. Comparación del material 3FPBK16

SPEOMM



MS EXCEL®

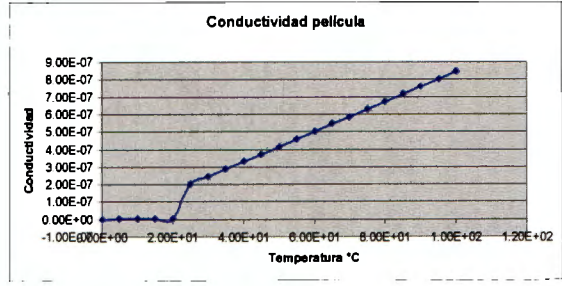
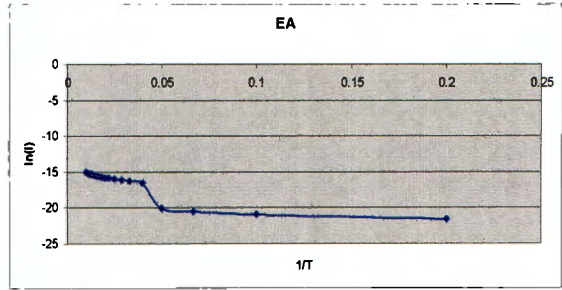
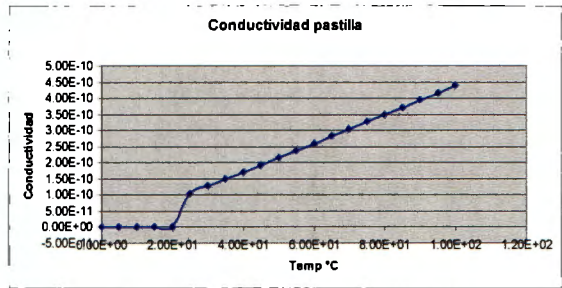
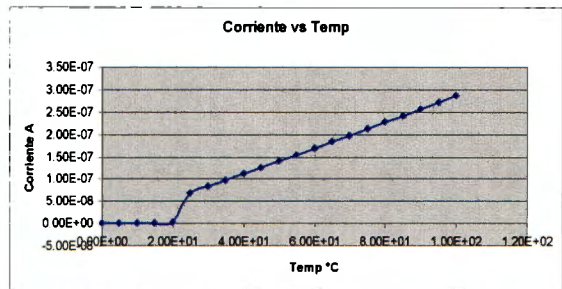
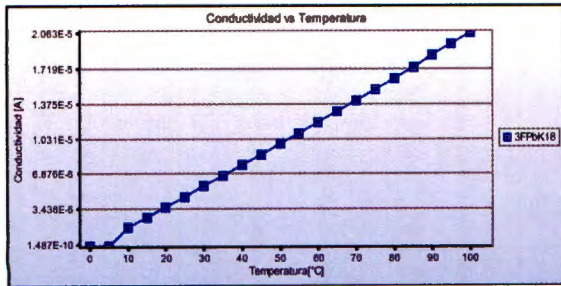
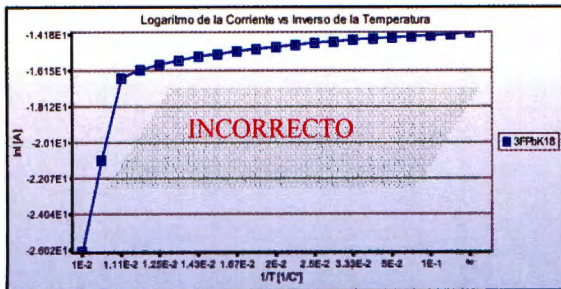
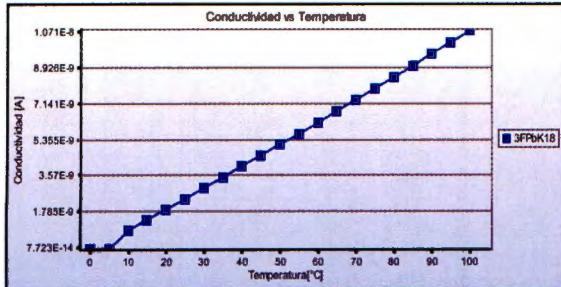
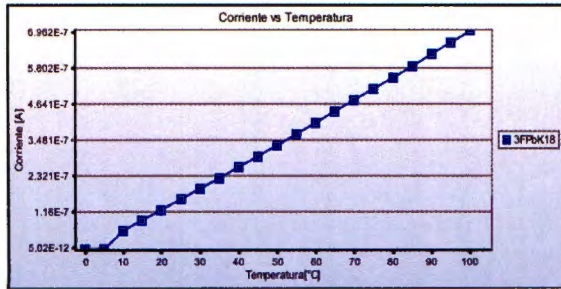


Figura 17. Comparación del material 3FPBK17

SPEOMM



MS EXCEL®

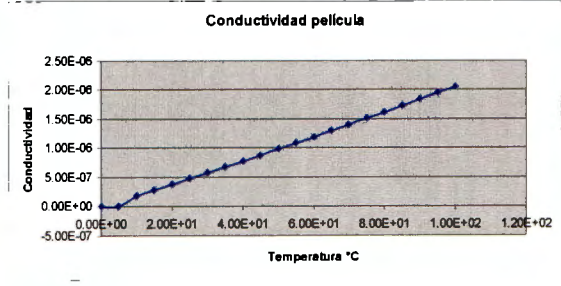
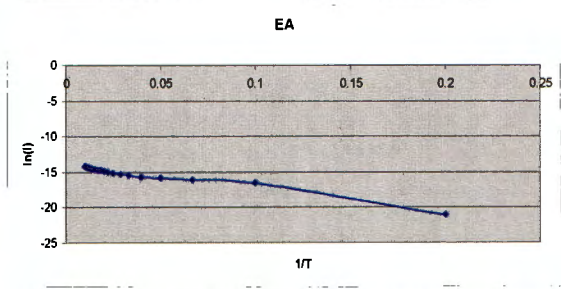
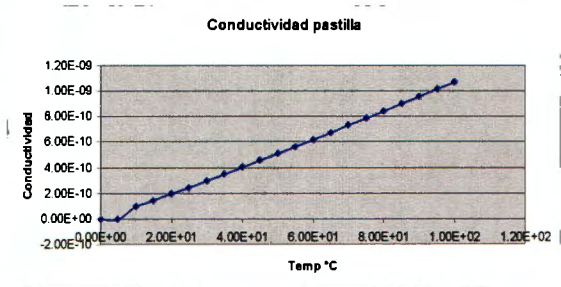
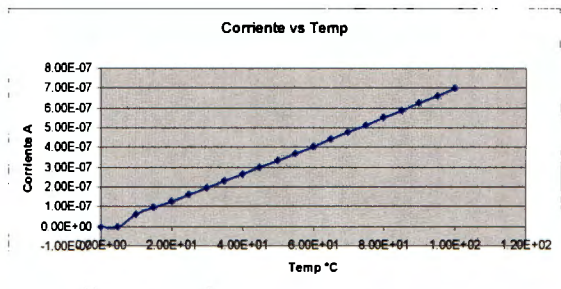
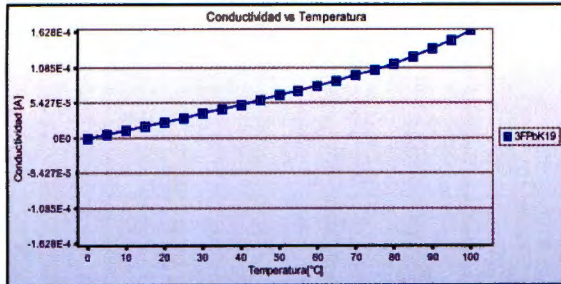
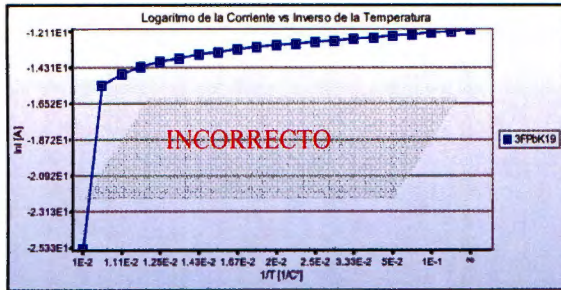
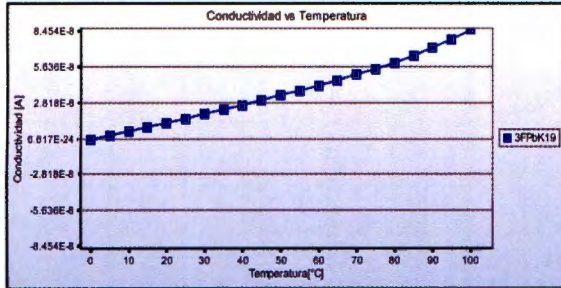
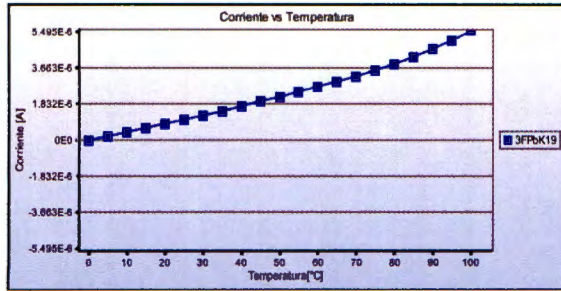


Figura 18. Comparación del material 3FPBK18

SPEOMM



MS EXCEL®

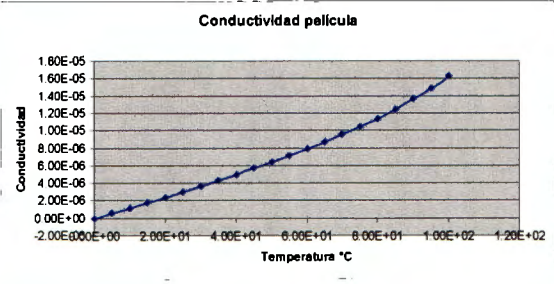
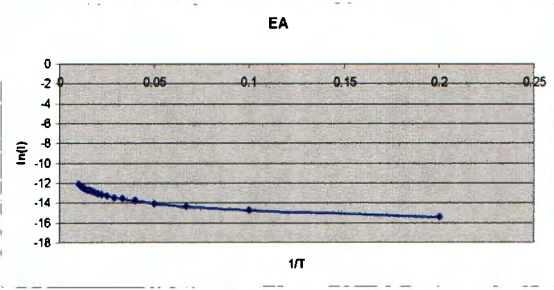
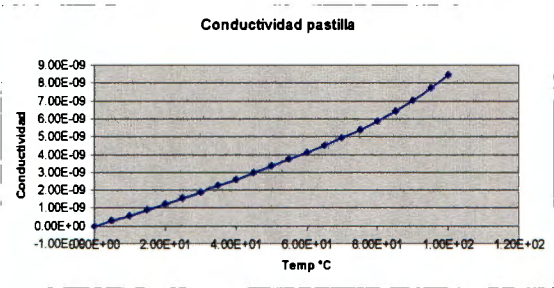
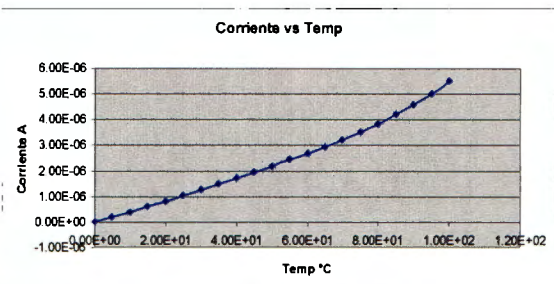
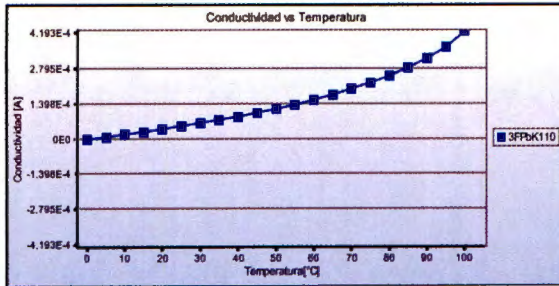
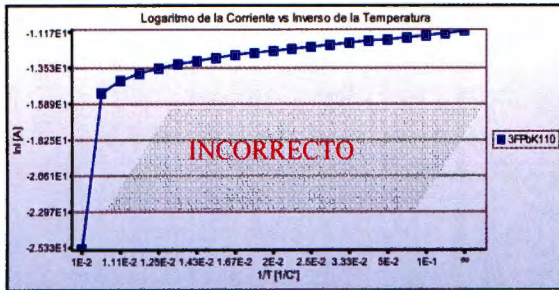
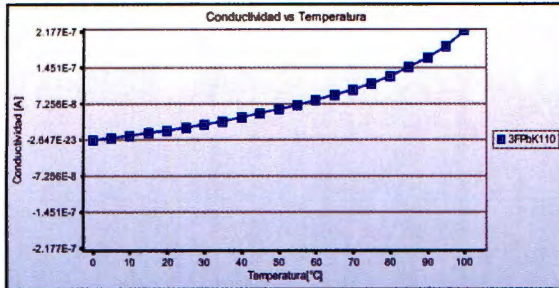
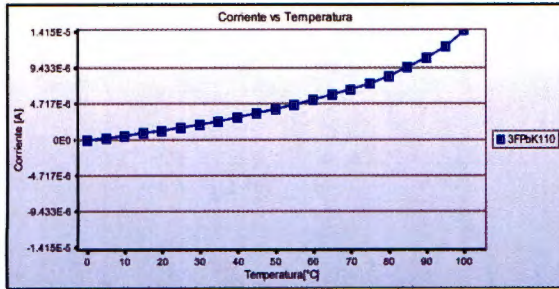


Figura 19. Comparación del material 3FPBK19

SPEOMM



MS EXCEL®

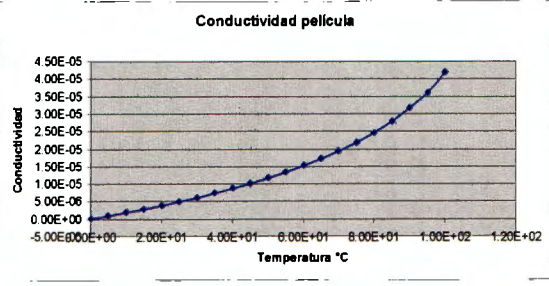
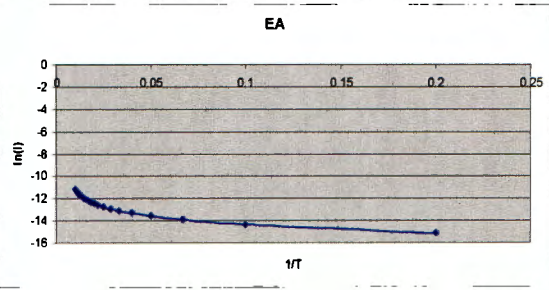
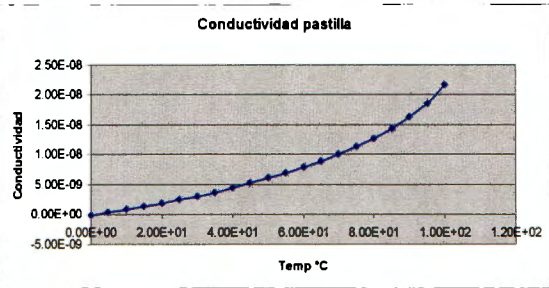
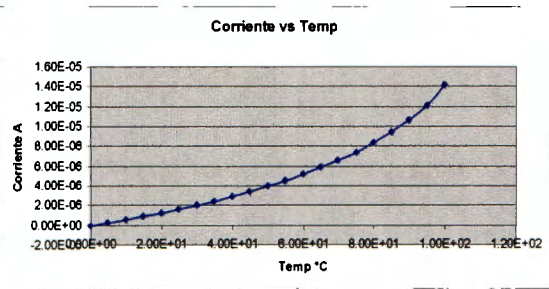


Figura 20. Comparación del material 3FPBK110

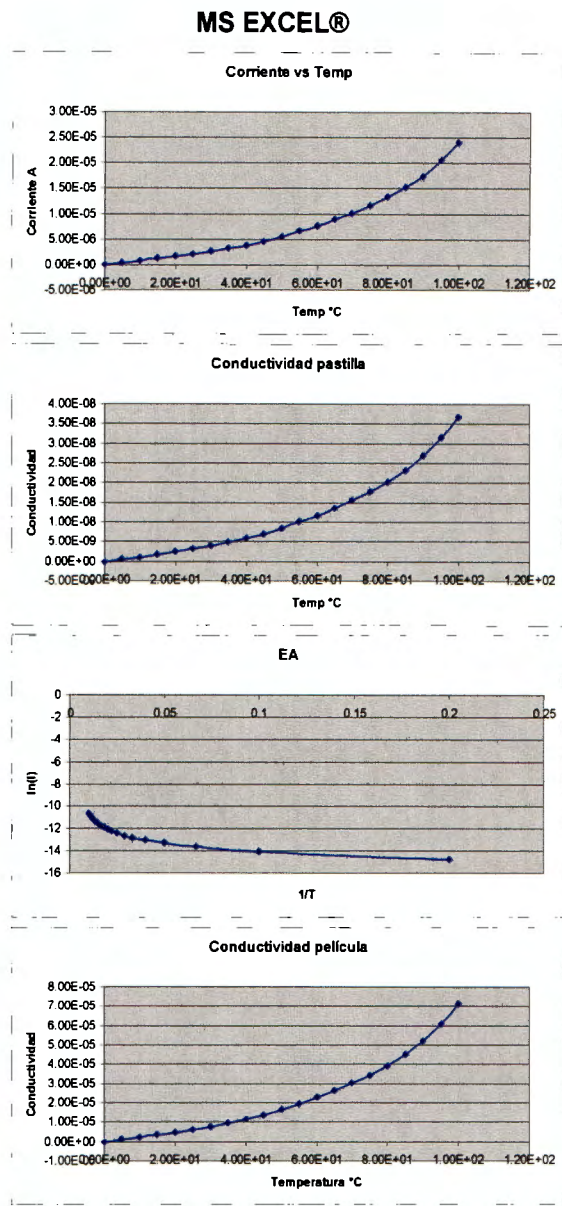
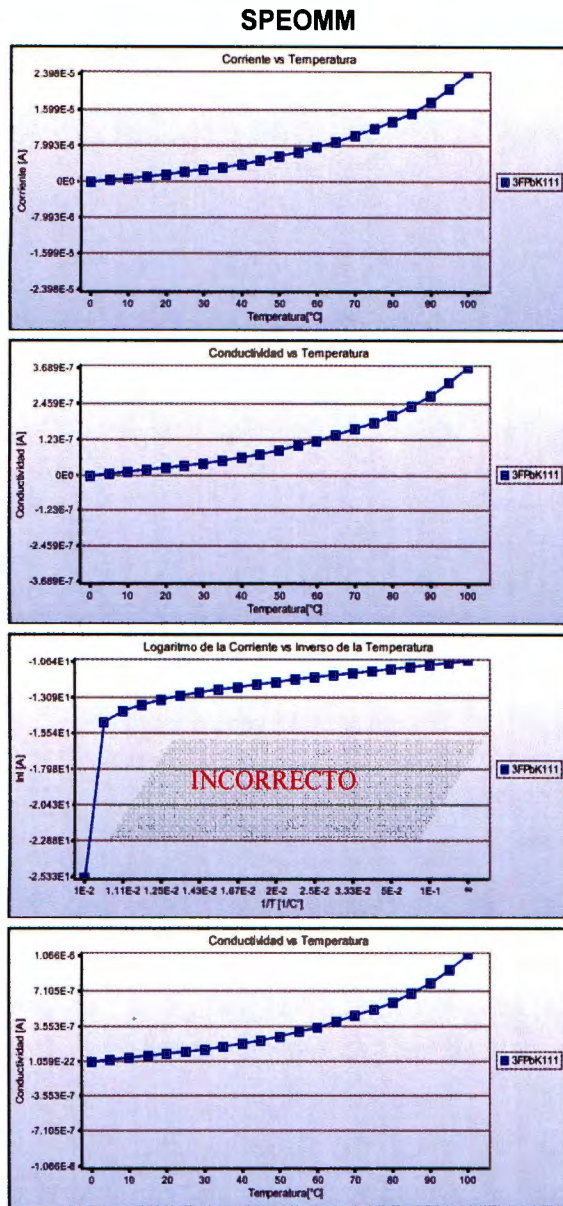
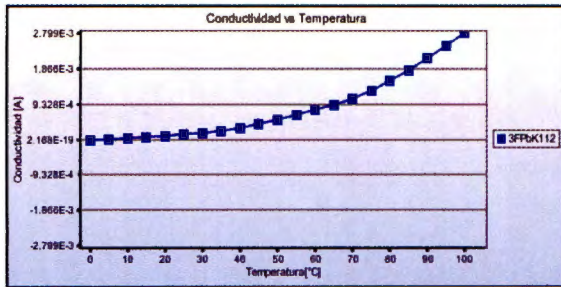
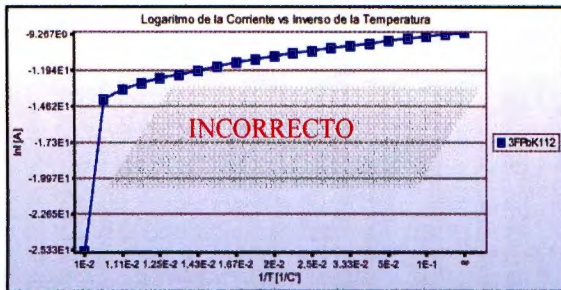
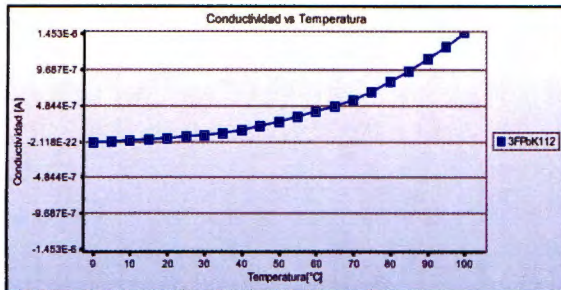
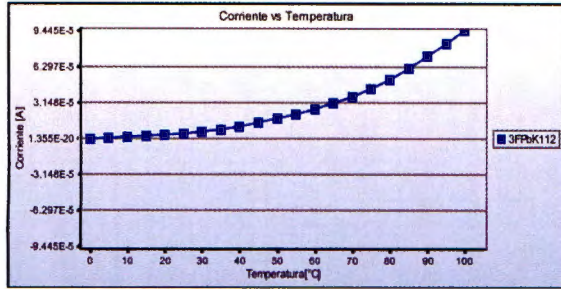


Figura 21. Comparación del material 3FPBK111

SPEOMM



MS EXCEL®

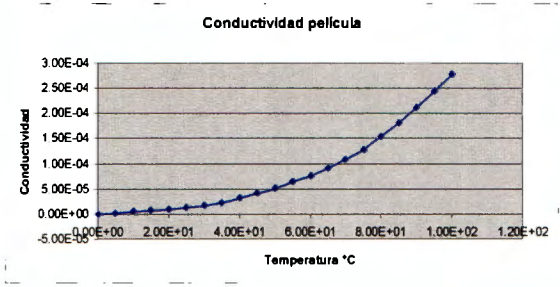
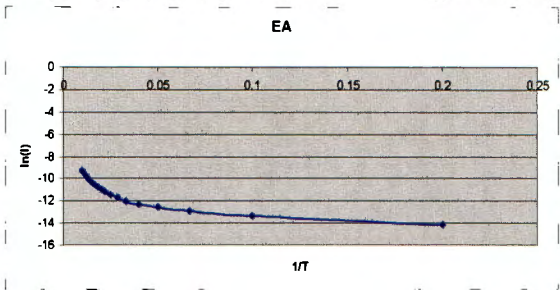
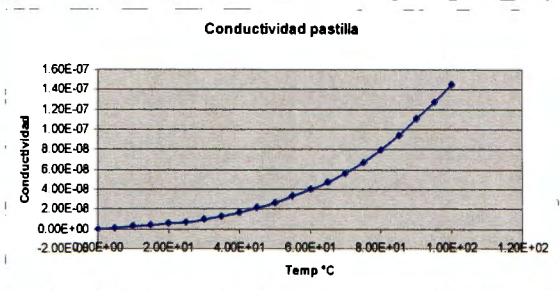
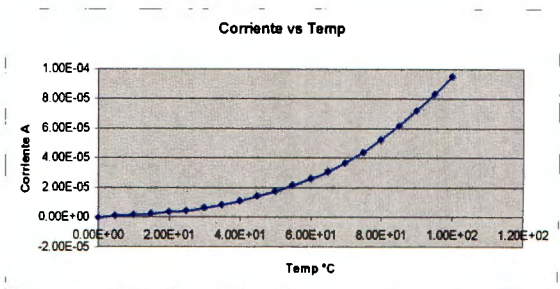
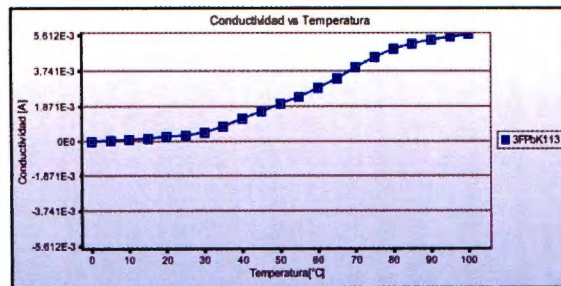
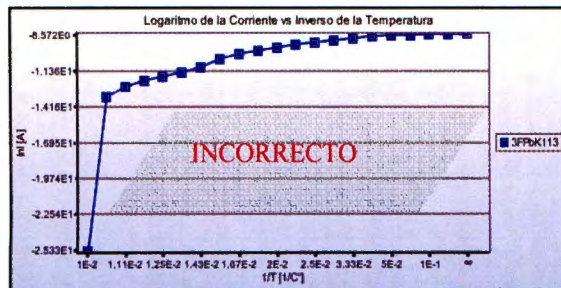
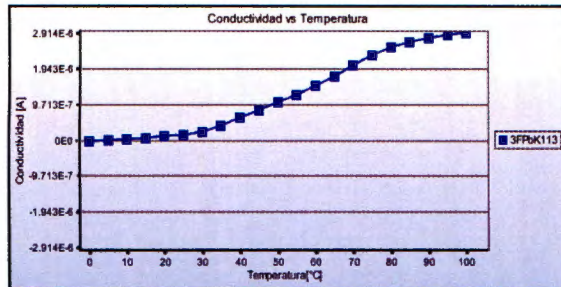
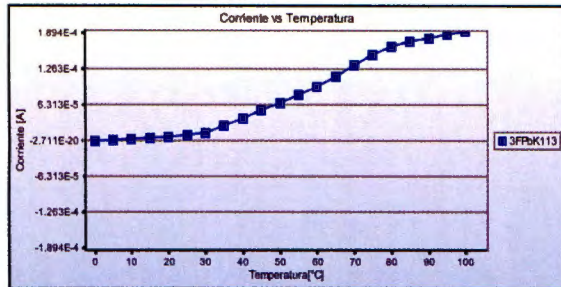


Figura 22. Comparación del material 3FPBK112

SPEOMM



MS EXCEL®

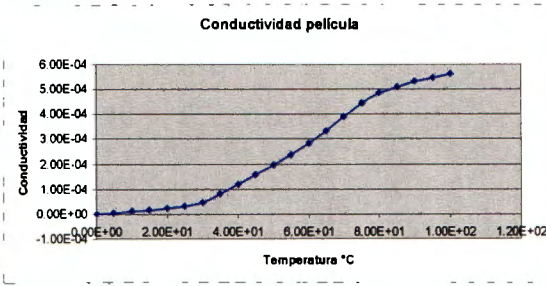
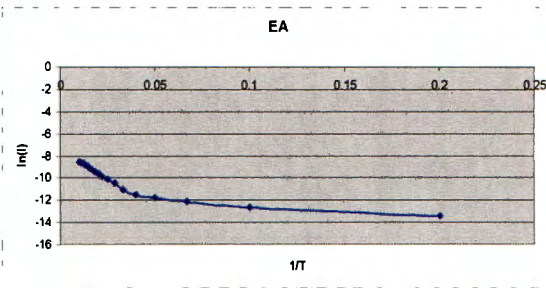
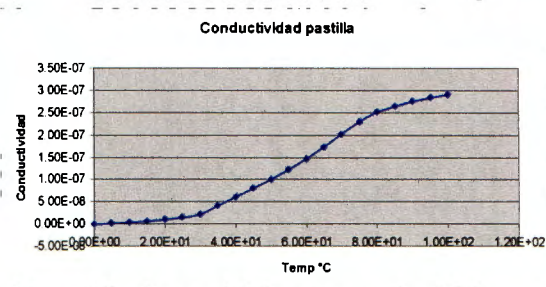
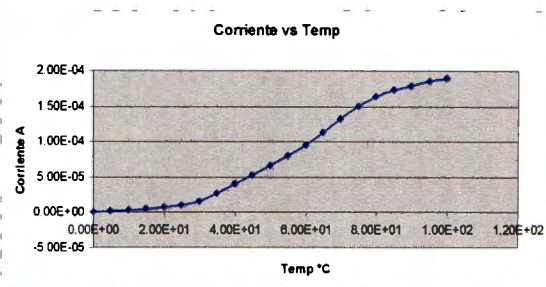


Figura 23. Comparación del material 3FPBK113

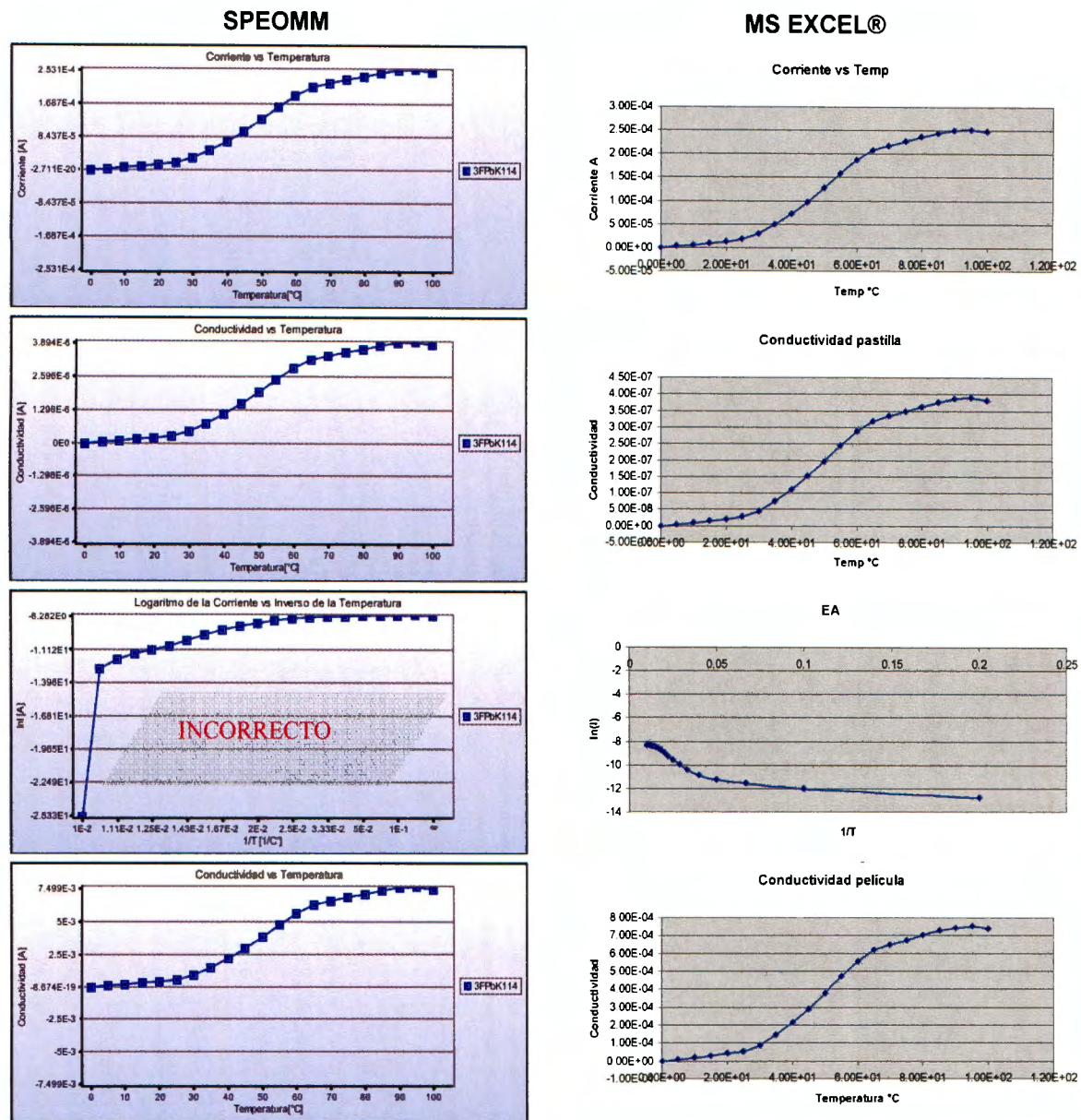


Figura 24. Comparación del material 3FPBK114

Para realizar las correcciones necesarias en la gráfica de logaritmo natural de la corriente contra el inverso de la temperatura, fue necesario modificar el código JAVA®. El programa, como se puede verificar en la sección de anexos, realiza las gráficas pidiendo un número determinado de coordenadas, para la parte de eléctrica, están supuestos 21 pares, aunque el programa puede permitir más datos, como el caso de graficación para el módulo de óptica.

Los datos que se manejan en todas las graficas, excepto en la analizada en esta sección, son de tipo lineal en ambos ejes, lo cual permite realizar una grafica con mayor facilidad, sin embargo no sucede lo mismo con la grafica del logaritmo natural de

la corriente, ya que en el eje x utiliza $1/T$, lo cual se interpreta como inversamente proporcional, es por ello que conforme T tiende a infinito el valor $1/T$ tiende a cero, y viceversa, de esta forma mientras T crezca de manera constante se podrá ver cómo los puntos $1/T$ tienden a juntarse cada vez más, hasta tender a 0.

El problema del gráfico, supone entonces un error de graficación y también de interpretación de datos; el primer caso debido a la diferencia de ejes (lineales e inversos) y el segundo, por el ordenamiento de la matriz $1/T$, esta matriz debe ordenarse de manera ascendente, de igual forma se espera que la matriz del eje "y" (logaritmo natural de la corriente) esté ordenada según sea su valor correspondiente en el eje "x" (inverso de la temperatura).

Para la solución del problema de ejes, lo que se realizó fue mediante interpolación lineal entre puntos, se generaron nuevas matrices "x" y "y" en donde la relación con respecto del eje "x" es lineal. Para ello se toma el rango del eje "x", se divide entre el número de datos y finalmente se establecen puntos lineales cuyos valores correspondientes en "y" deben seguir la fórmula de interpolación lineal descrita por:

$$Y' = \frac{Y_1 - Y_2}{X_1 - X_2} (Vx - X_2) + Y_2 \quad \text{ec. [3]}$$

Donde:

Y' valor de la matriz Y lineal

Vx valor de x al cual se quiere encontrar su Y correspondiente

Y_1, Y_2, X_1 y X_2 valores correspondientes a las matrices originales (X con valores $1/T$ donde T tiene aumentos de 5°C).

A continuación, se verá cómo se desarrolló la solución, se pondrán gráficos correspondientes a las matrices originales tanto en MS Excel® como en SPEOMM y se verán las correcciones realizadas mediante la interpolación lineal de datos.

Es importante mencionar que la gráfica interpolada es un aproximación casi exacta de la gráfica real, por lo que sirve para darnos cuenta de la tendencia de la gráfica, además cabe mencionar que la obtención de la energía de activación también se realiza mediante la obtención de la pendiente de la curva a dos puntos dados, por lo que se realiza una interpolación ajustando los datos de las matrices interpoladas y las originales con los valores que el usuario solicita. De esta forma es evidente, que la energía de activación no cambia nada, además de que a la computadora se le facilita la obtención de los valores interpolados porque el tiempo de búsqueda es menor.

El código correspondiente al módulo eléctrico, tiene una sección en la cual se puede observar lo descrito anteriormente, se puede verificar la generación de las matrices interpoladas linealmente para la obtención de la gráfica de logaritmo natural de la corriente contra el inverso de la temperatura.

En las Figuras 25 a 32 se puede observar el gráfico de SPEOMM que mostraba anteriormente (Figuras 25 y 29), el comportamiento real graficado por MS Excel® (Figuras 26 y 30), la corrección mediante las matrices interpoladas en SPEOMM (Figuras 27 y 31) y el comportamiento de valores interpolados en MS Excel® (Figuras 28 y 32).

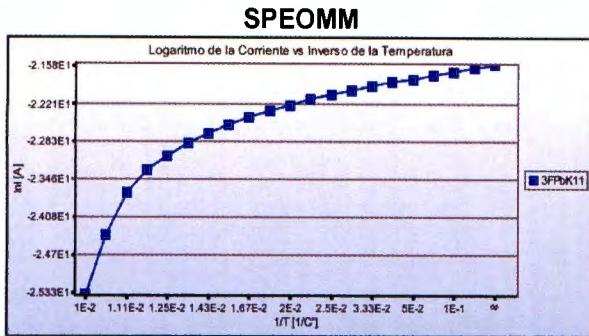


Figura 25. Gráfica del material 3FPbK11 incorrecta

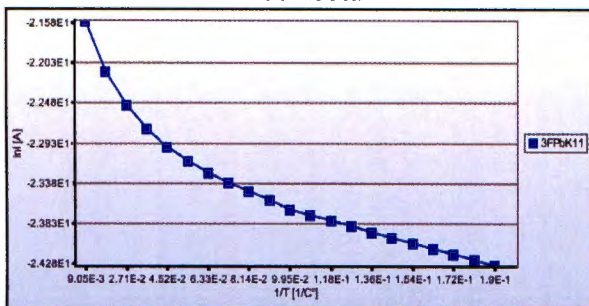


Figura 27. Gráfica del material 3FPbK11 obtenida por valores interpolados

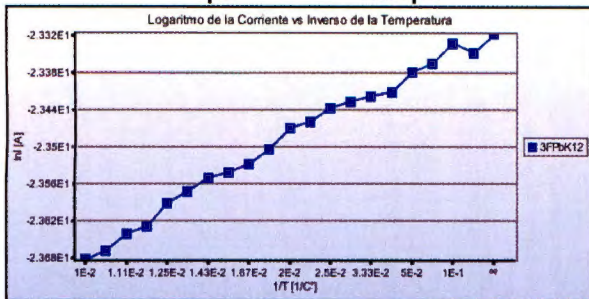


Figura 29. Gráfica del material 3FPbK12 incorrecta

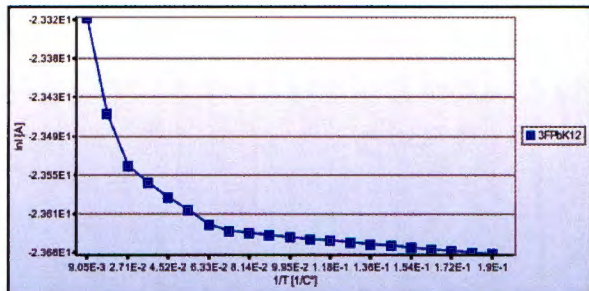


Figura 31. Gráfica del material 3FPbK12 obtenida por valores interpolados

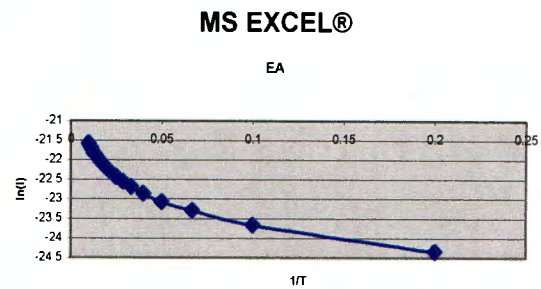


Figura 26. Gráfica del material 3FPbK11 original

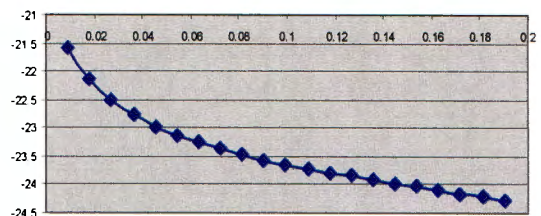


Figura 28. Gráfica del material 3FPbK11 modificada

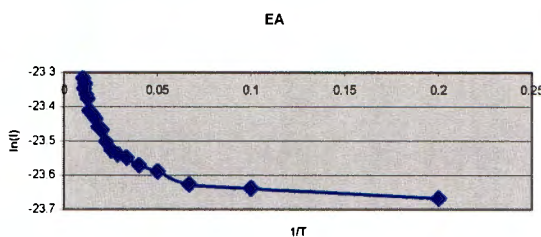


Figura 30. Gráfica del material 3FPbK12 original

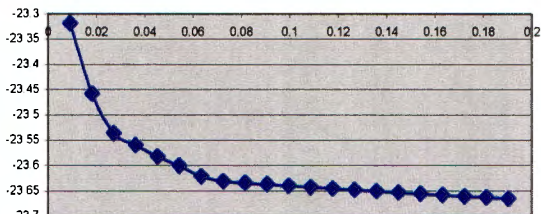


Figura 32. Gráfica del material 3FPbK12 modificada

4.2 Validación Óptica

El escritorio de la sección óptica analiza sólo materiales con estructura de película, y se analizan las gráficas de transmitancia contra longitud de onda y coeficiente de absorción contra la energía del fotón. Así mismo, se pueden obtener la energía de activación y la banda prohibida, la cual es la magnitud de la brecha óptica que permite determinar la transición a la banda de conducción.

La validación se realizó con los datos obtenidos por medio de la Espectroscopía UV-vis y las siguientes fórmulas:

$$\alpha = -\ln\left(\frac{T}{d}\right) \quad \text{ec. [4]}$$

$$E_{\text{foton}} = \frac{hc}{\lambda} \quad \text{ec. [5]}$$

Donde:

α	coeficiente de absorción [cm^{-1}]
T	transmisión óptica evaluada del espectro UV-vis [%]
d	espesor de la película [cm]
E_{foton}	energía del fotón [eV]
h	constante de Planck [ergs]
c	velocidad de la luz [cm/s]
λ	longitud de onda [cm]

Al igual que el escritorio de eléctrica, en el escritorio de óptica se calculan, de manera automática, las fórmulas anteriores, y la comparación se realizó con el programa de MS Excel®, es importante mencionar que la longitud de onda obtenida por la espectroscopía se encuentra en nanómetros (nm), por lo que en MS Excel® se tuvo en consideración la conversión, ya que SPEOMM la realiza de manera automática. El espesor de la película se determinó de 0.00015cm en los dos programas, y los materiales sobre los cuales se realizó la validación son: 18FtCo1, 18FtCo2, 18FtPb1, 18FtPb2, 18HF231, 18HF232, BOC10R, BOC11R, FCoK1, FCoK2, FPbK1, FPbK2, KF231, KF232 (ver ÍNDICE DE MATERIALES MOLECULARES).

En la Figura 33 se muestran las gráficas en los dos programas del primer material, en la comparación de gráficas y se detectaron dos errores en el coeficiente de absorción, en SPEOMM se encontraba multiplicado por 100, y el segundo error fue en las tablas: el primer dato del coeficiente de absorción resultaba ser calculado con el último dato de la transmitancia en las tablas. La comparación de la tabla se muestra en el ANEXO 2, donde se puede ver además que en las mediciones se encuentran datos entre un valor y cero al principio, debido a la corriente inversa que se genera por el aparato antes de

iniciar la medición, en SPEOMM esos datos los toma en cero para obtener una gráfica más limpia como resultado.

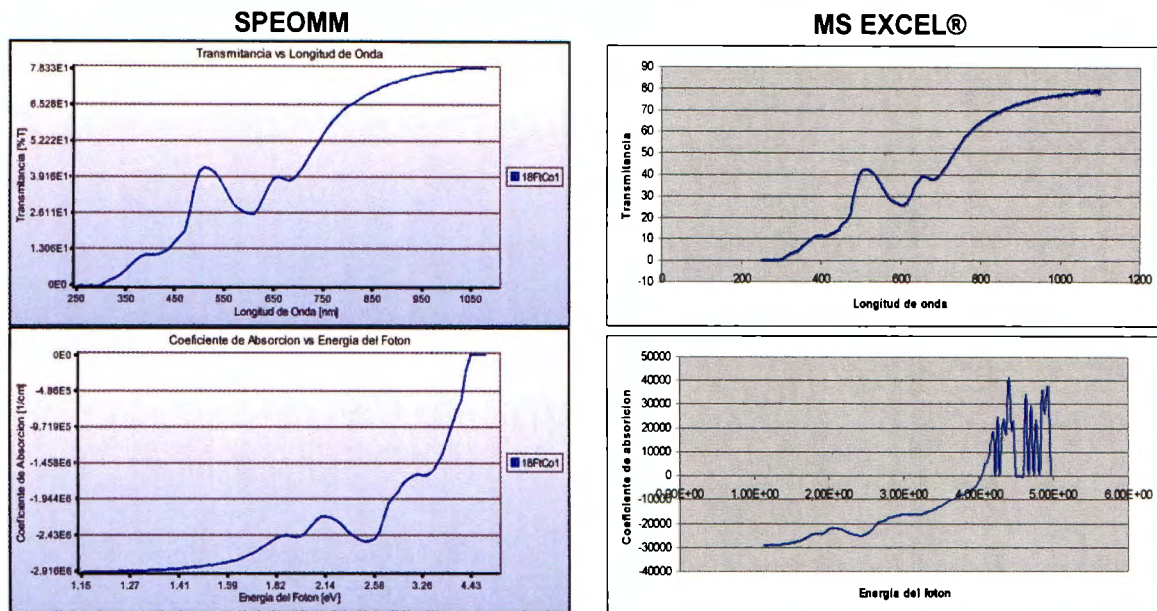


Figura 33. Gráficos del material 18FtCo1 antes de la corrección

Después de realizada la corrección en el código para invertir los valores del coeficiente de absorción, se prosiguió con la validación de los demás materiales. Además los valores que se despliegan en las tablas fueron modificadas de tal forma que coinciden con los valores de MS Excel® y los valores graficados. En las Figuras 34 a 47 se muestra las gráficas de comparación de los materiales analizados en SPEOMM y en MS Excel®.

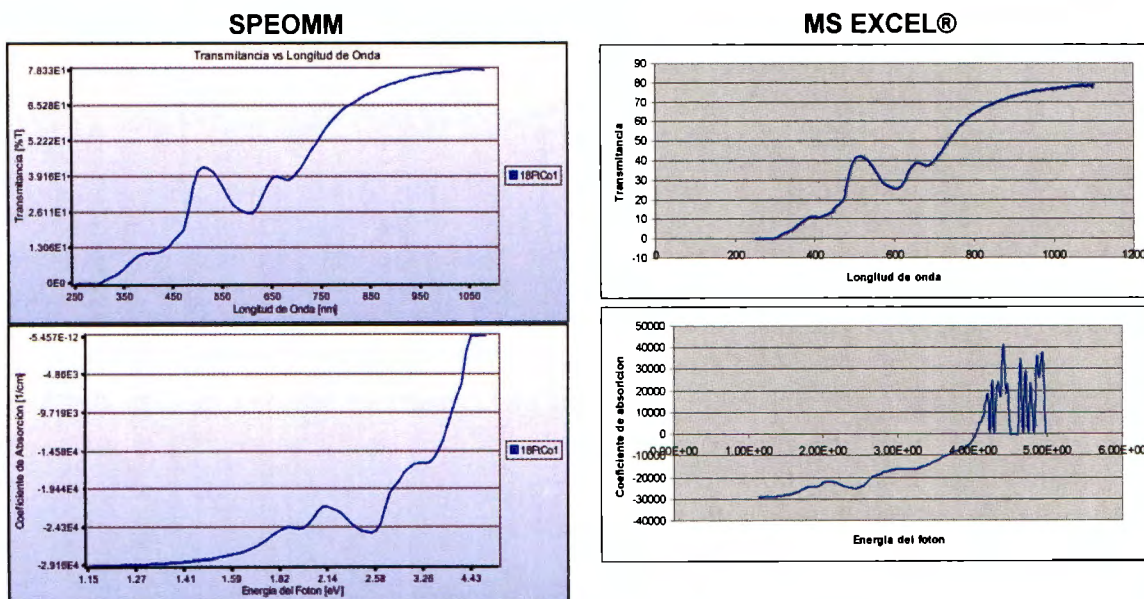


Figura 34. Comparación del material 18FtCo1

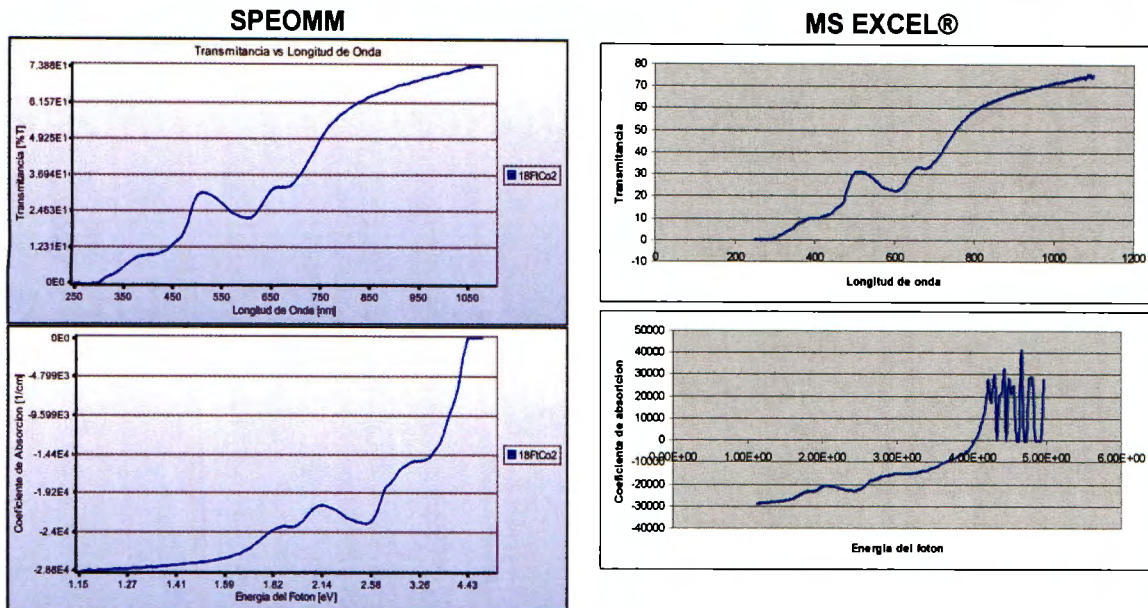


Figura 35. Comparación del material 18FtCo2

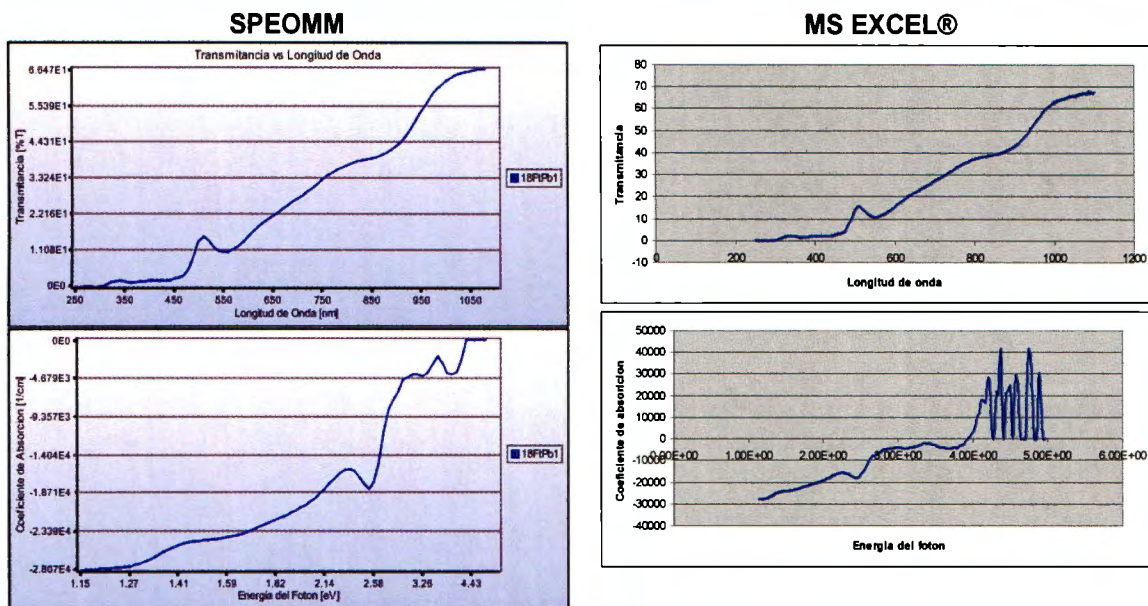


Figura 36. Comparación del material 18FtPb1

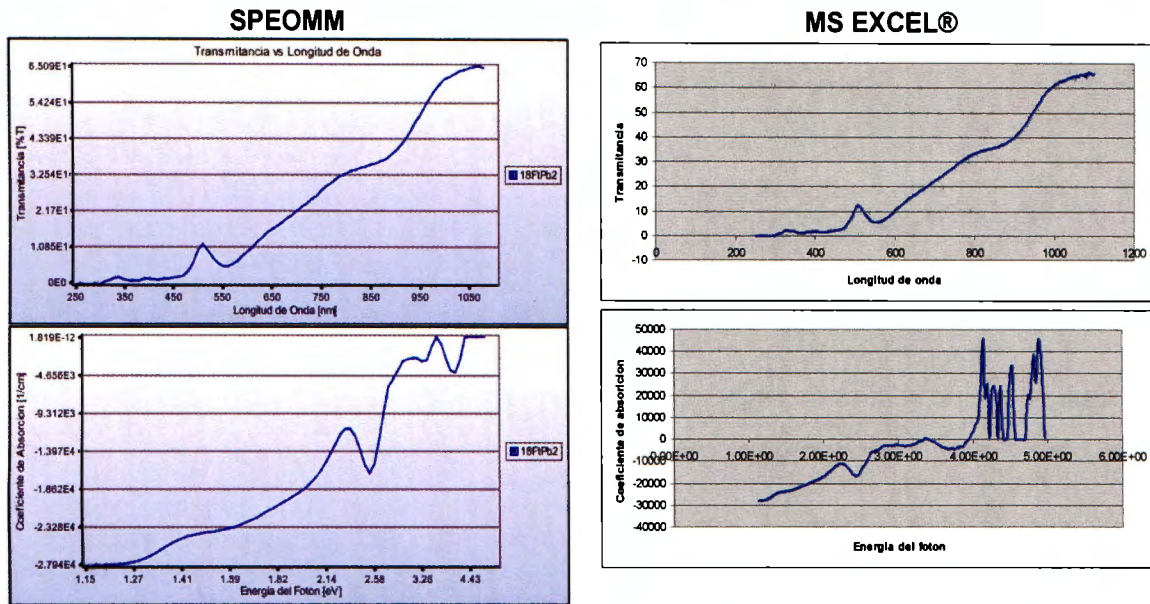


Figura 37. Comparación del material 18FtPb2

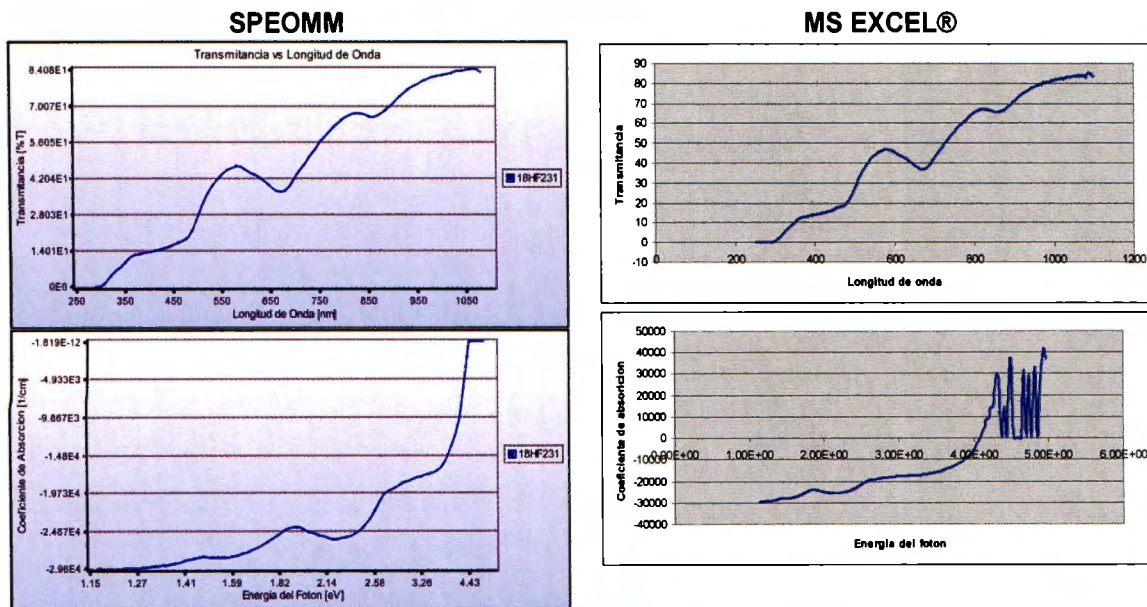


Figura 38. Comparación del material 18HF231

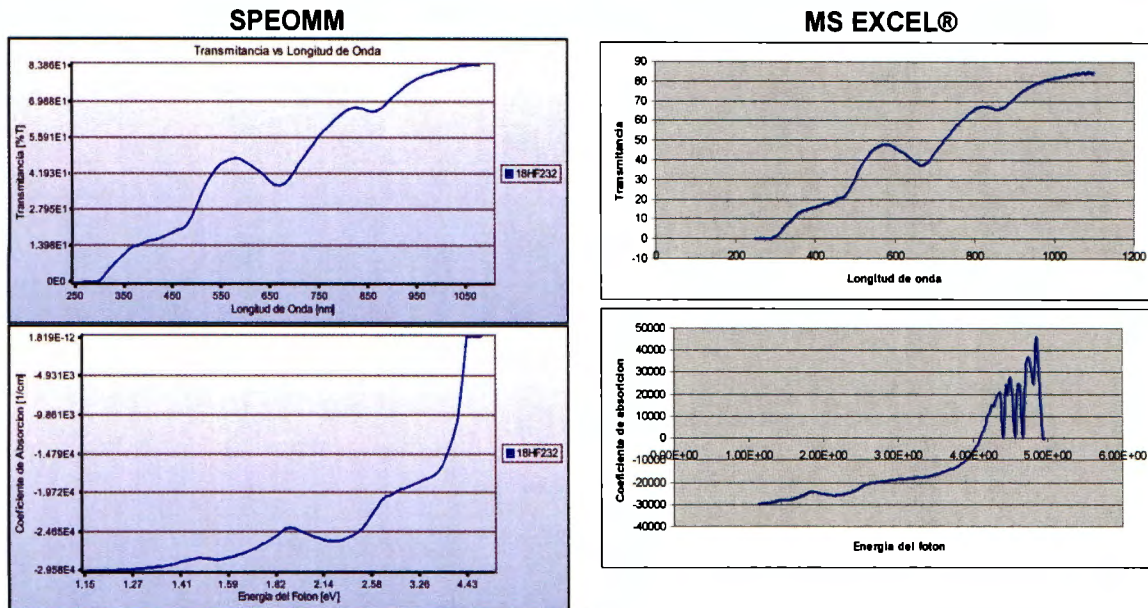


Figura 39. Comparación del material 18HF232

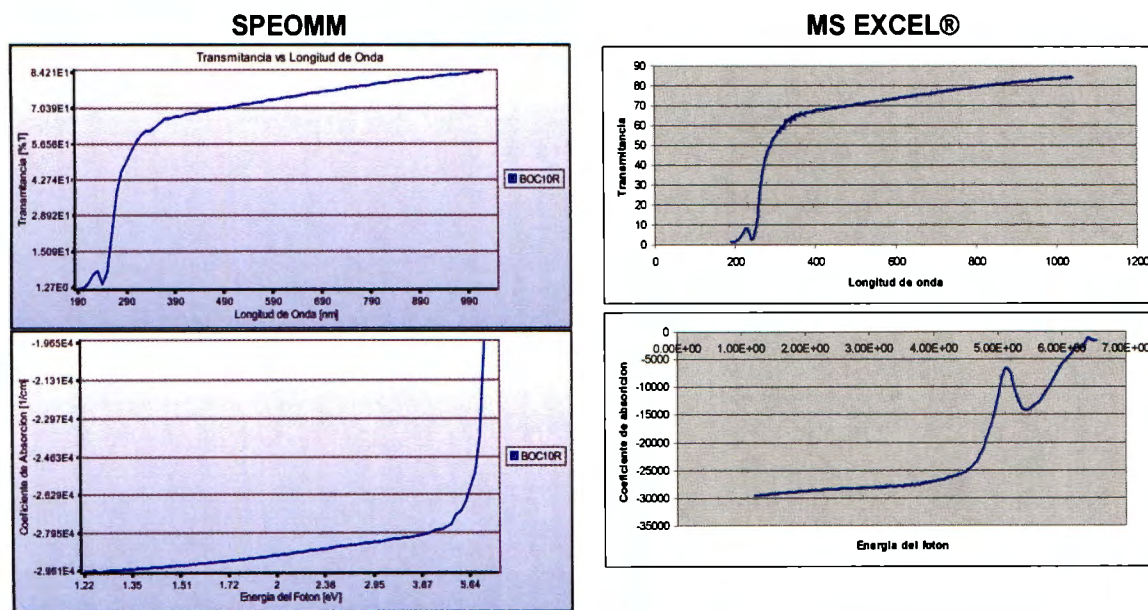


Figura 40. Comparación del material BOC10R

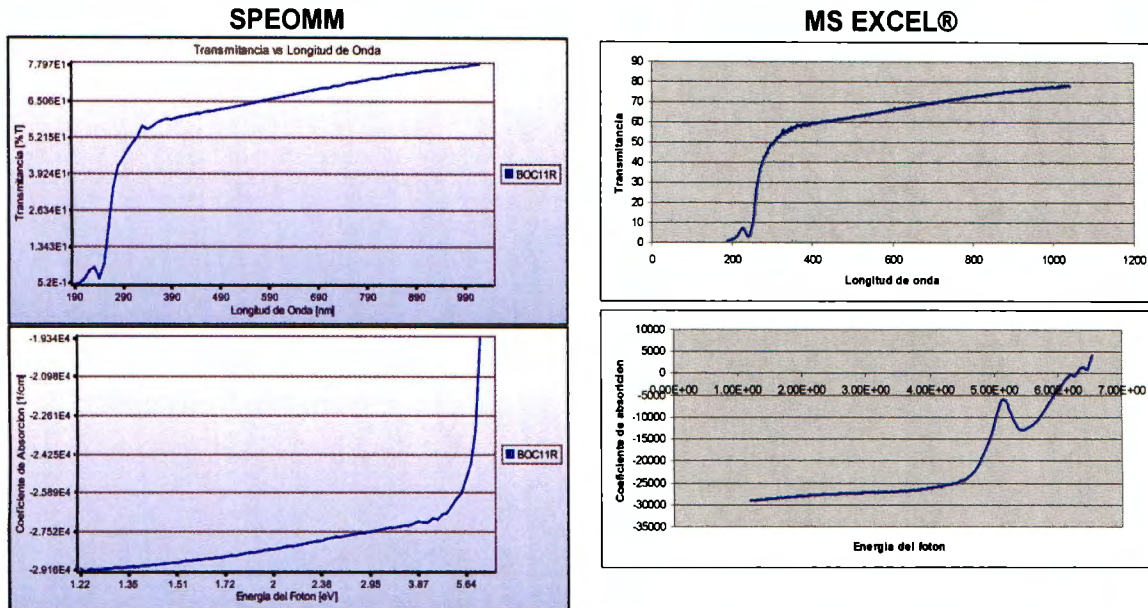


Figura 41. Comparación del material BOC11R

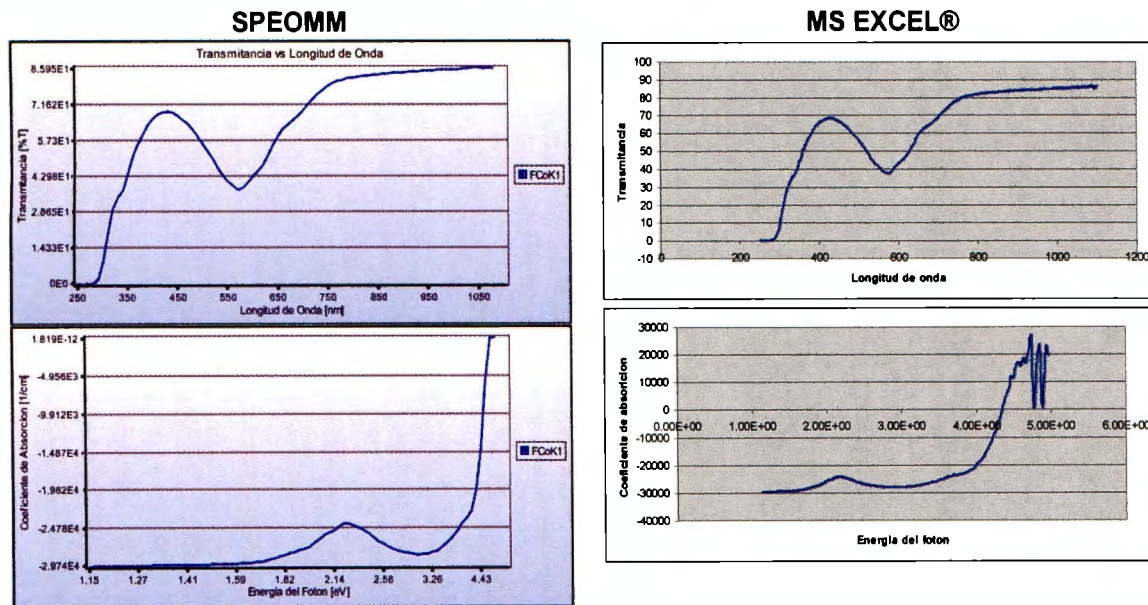


Figura 42. Comparación del material FCoK1

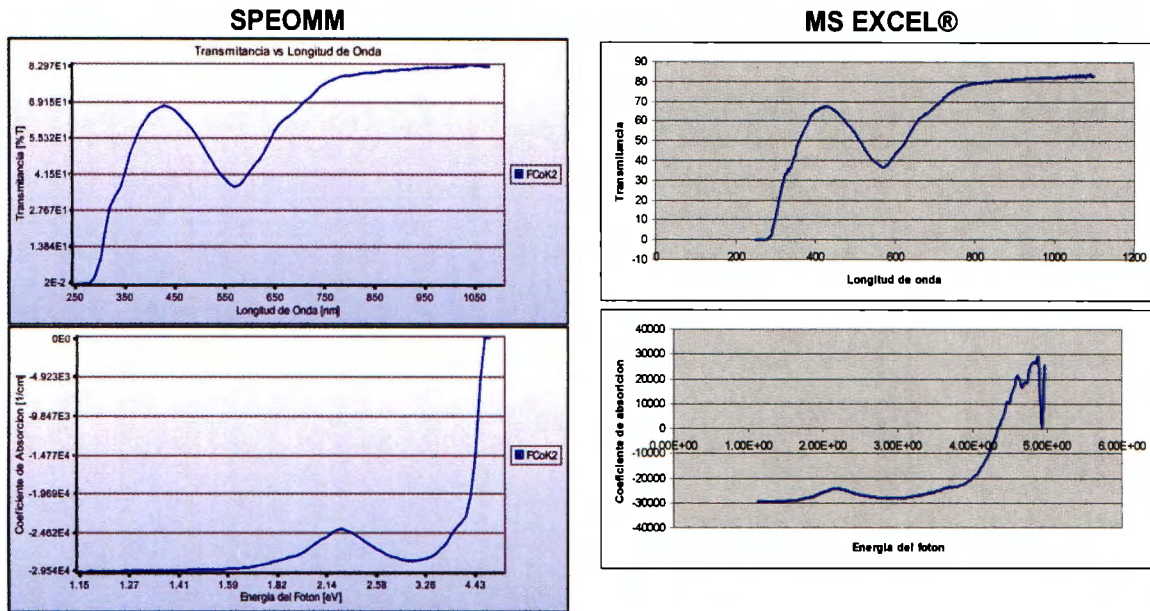


Figura 43. Comparación del material FCoK2

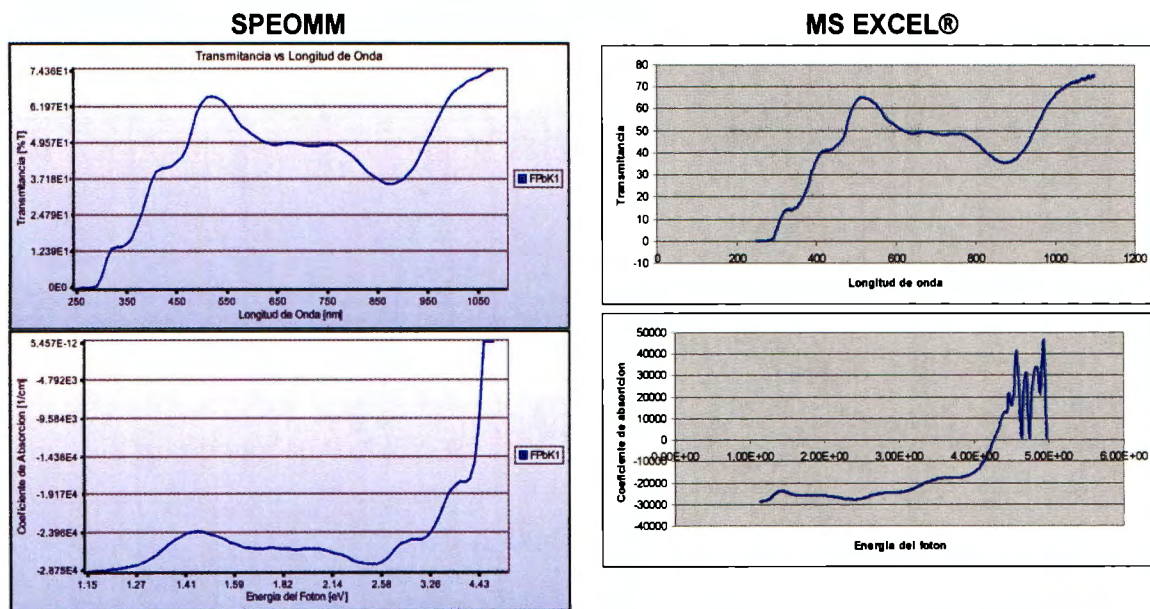


Figura 44. Comparación del material FPbK1

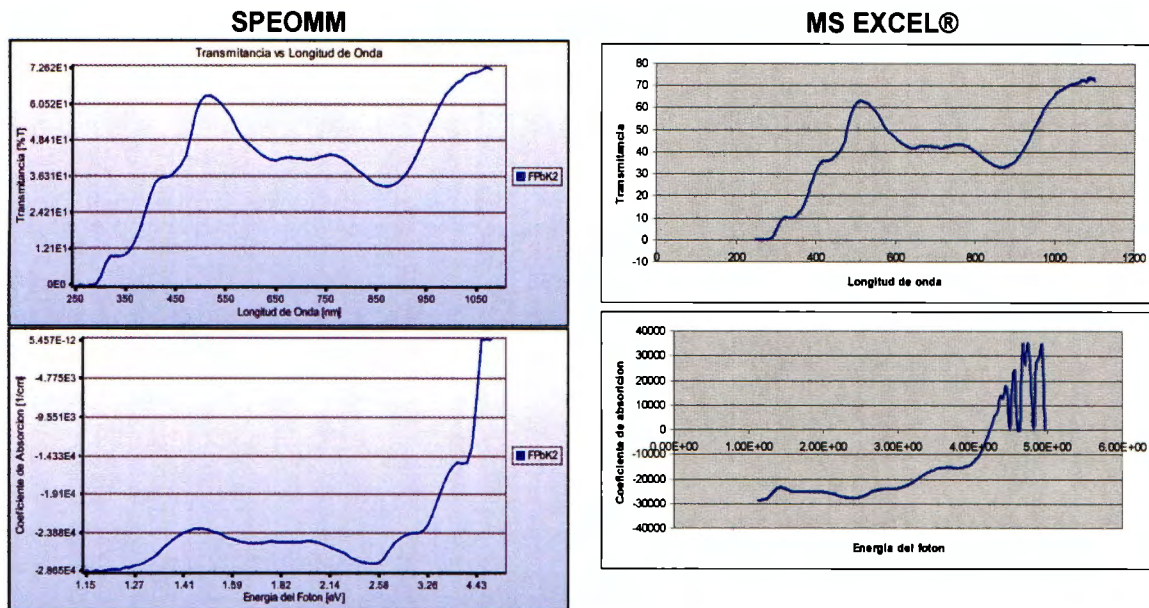


Figura 45. Comparación del material FPbK2

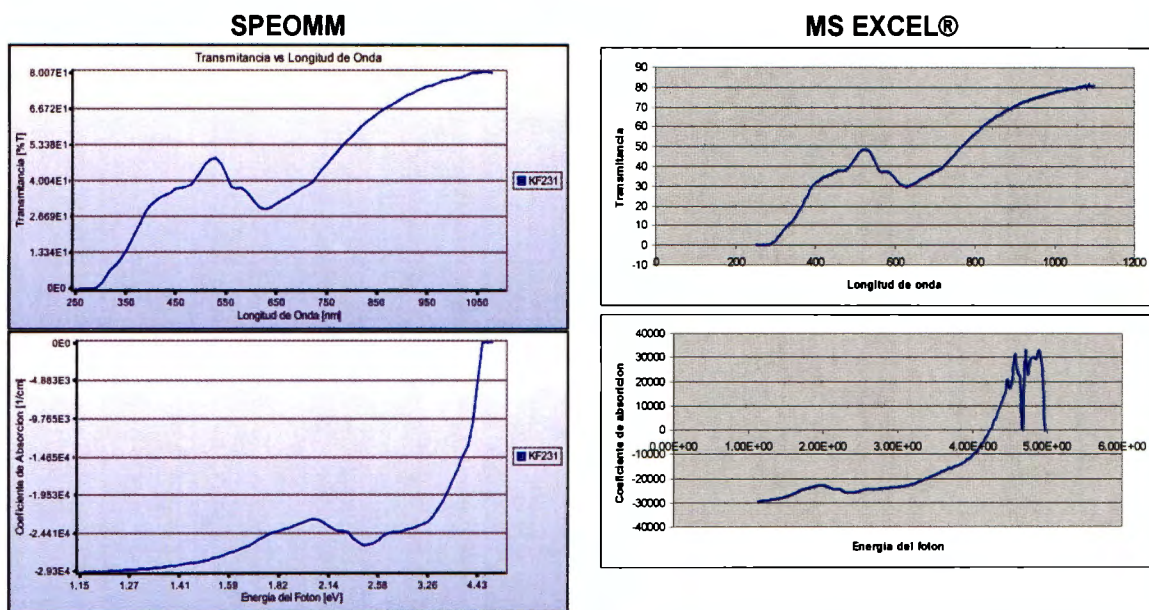


Figura 46. Comparación del material KF231

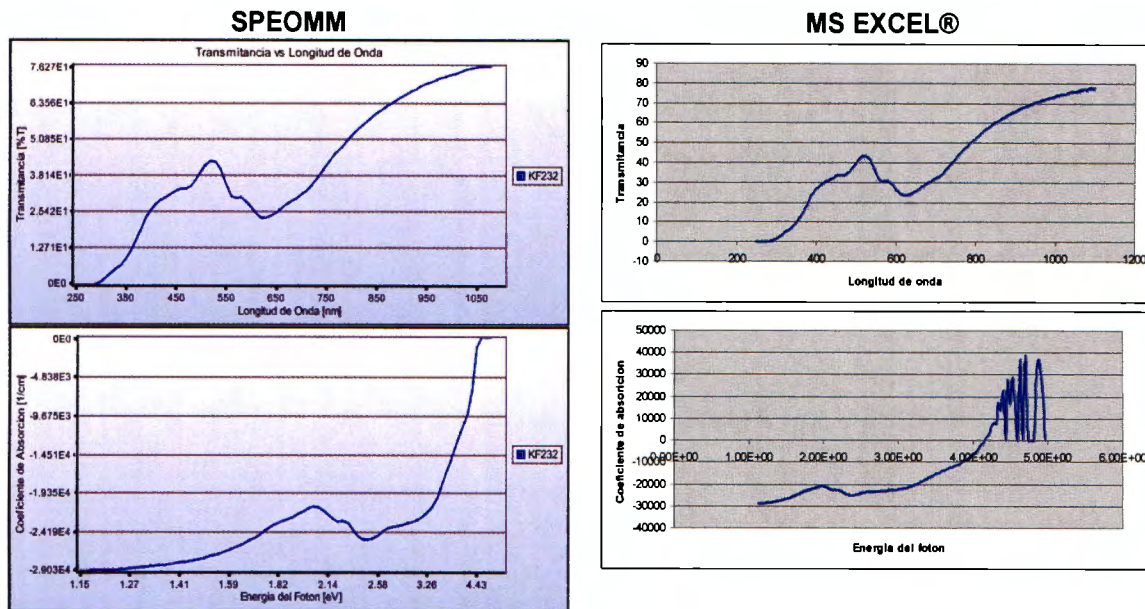


Figura 47. Comparación del material KF232

4.3 Validación de Espectroscopía IR

El módulo de IR se divide en tres partes. La primera parte (Materias primas vs. productos), consiste en verificar la proporción de compatibilidad entre el producto generado y las materias primas que lo componen; la segunda parte (degradación), permite realizar una comparación entre dos productos; en ambos casos SPEOMM realiza una comparación de los valores de los máximos de longitudes de onda de cada uno de los materiales, especificando una tolerancia que puede ser nula, ± 3 nm o 5 nm.

Para realizar la validación, se generó un archivo de MS Excel® que fuese capaz de otorgar los mismos resultados que SPEOMM; ingresando los valores de las longitudes de onda medidas por medio del equipo de IR. Se realizó la compatibilidad de una materia prima con el producto, o con otra materia prima, por medio de la comparación del máximo de cada uno de los materiales a analizar.

Las fórmulas implementadas son condicionales "for", que asignan un valor booleano verdadero cuando se detecta que hay un pico común entre las materias comparadas; para determinar la igualdad existe un rango de tolerancia de 0 nm, ± 3 nm o ± 5 nm, establecido convencionalmente. La igualdad entre un material y otro, se determina mediante la comparación de cada uno de los datos de longitud de onda de una matriz, con los datos correspondientes al otro material. Para obtener los máximos locales se verifica el número de picos, por lo que se espera que el dato anterior y el siguiente sean menores al dato analizado, con ello se determina que n es un pico del material.

Para la comparación de picos (longitudes de onda máximos dentro de un material) se comparan los valores máximos de cada una de las matrices de los materiales.

Los resultados de la validación de espectroscopia IR en MS Excel® cuentan con una precisión de 3 decimales, y se muestran en las tablas 2 a 6, donde se especifica el número total de longitudes de onda, el número de datos de los dos materiales comparados y el número y porcentaje de igualdad entre los máximos de cada material. En la Figura 48, se muestran los resultados obtenidos por el programa de SPEOMM comparando los mismos materiales que en MS Excel®; Se determinó el materia 18FtCo como el producto y los materiales 18FtCo1, 18FtCo2, FPbK1, FPbK2 y 18HF231 como las materias primas (ver Índice de Materiales Moleculares). Los valores obtenidos por MS Excel® y por SPEOMM resultaron iguales por lo que se demuestra que el programa funciona de manera adecuada.

Tabla 2. Comparación entre 18FtCo y 18FtCo1

# datos	1869
% correspondencia	13.026
maximos mp1	261
maximos mp2	71
maximos comunes	34

Tabla 3. Comparación entre 18FtCo y 18FtCo2

# datos	1869
% correspondencia	9.578
maximos mp1	261
maximos mp2	73
maximos comunes	25

Tabla 4. Comparación entre 18FtCo y FPbK1

# datos	1869
% correspondencia	27.586
maximos mp1	261
maximos mp2	321
maximos comunes	72

Tabla 5. Comparación entre 18FtCo y FPbK2

# datos	1869
% correspondencia	27.586
maximos mp1	261
maximos mp2	321
Maximos comunes	72

Tabla 6. Comparación entre 18FtCo y 18HF231

# datos	1869
% correspondencia	2.681
maximos mp1	261
maximos mp2	51
Maximos comunes	7

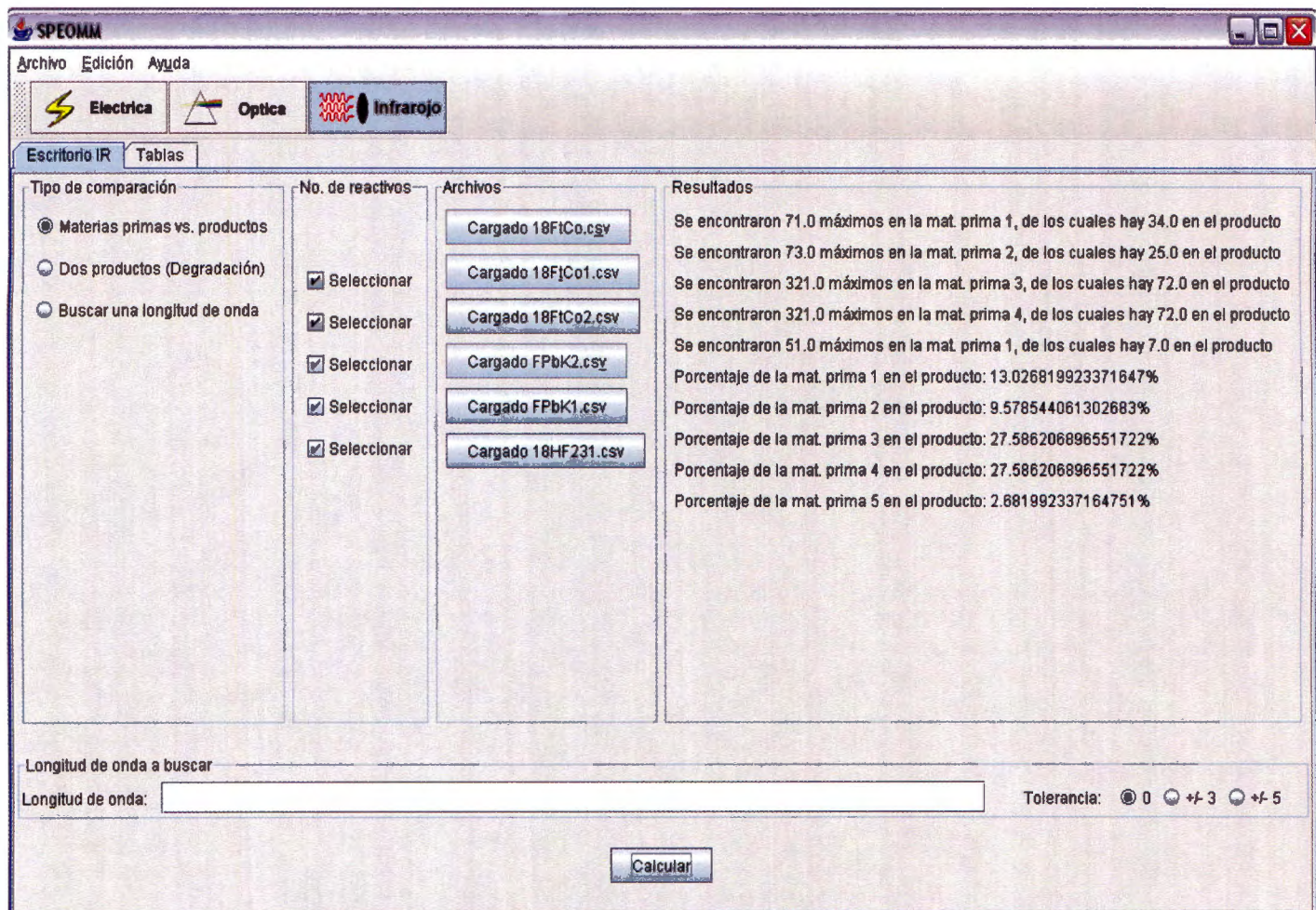


Figura 48. Resultados de SPEOMM para el análisis de IR

En la tercer parte (Buscar una longitud de onda), se determina si existe un valor deseado de longitud de onda en el material a analizar, por lo que validó mediante el chequeo de tablas de forma manual, obteniendo un resultado satisfactorio

4.4 Modificaciones que se realizaron al programa de SPEOMM

➤ Para acceder a los créditos se hacía mediante el submenú "Acerca de SAIMM" que se encontraba dentro del menú de Archivo (Figura 49), la corrección consistió en cambiar el título del submenú por "Acerca de SPEOMM", y ubicarlo dentro en un nuevo menú denominado Ayuda (Figura 50).



Figura 49. Ubicación y leyenda de los créditos antes de la corrección

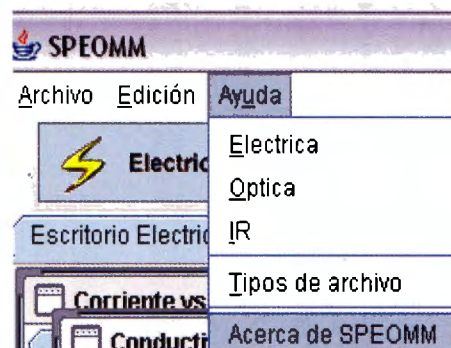


Figura 50. Ubicación y leyenda de los créditos final

➤ En la Figura 51, se puede observar el "Modificado, actualizado y validado por Cristina Aparicio y Luis Villarreal" dentro de la pantalla de créditos, el cual se le agregó como parte del reconocimiento de este trabajo.

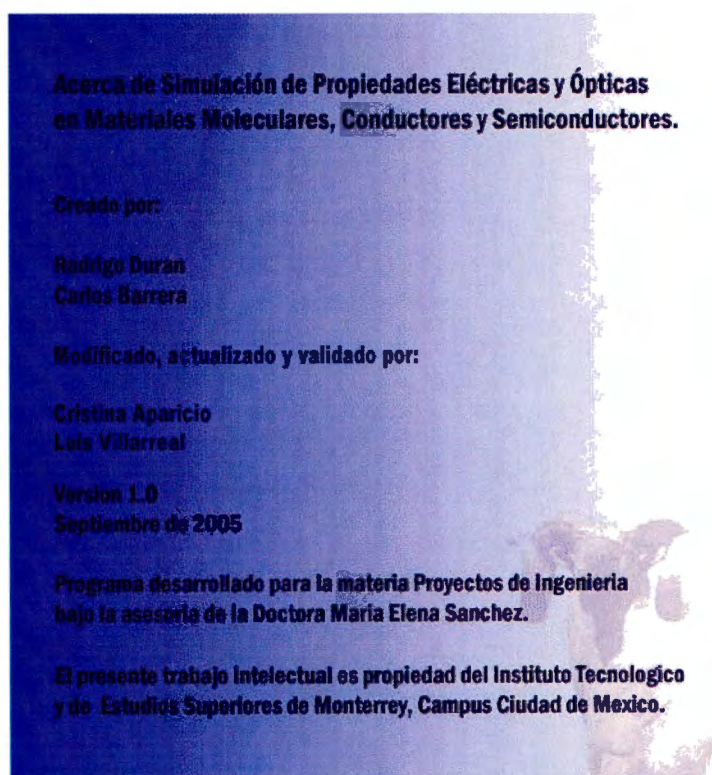


Figura 51. Resultados de SPEOMM para el análisis de IR

➤ Se cambió el texto del botón del escritorio de eléctrica "EA" que se muestra en la Figura 52, por el texto " $\ln(I)/(1/T)$ " como se puede observar en la Figura 53.



Figura 52. Leyenda del botón para la obtención de la tercer gráfica de eléctrica antes de la corrección

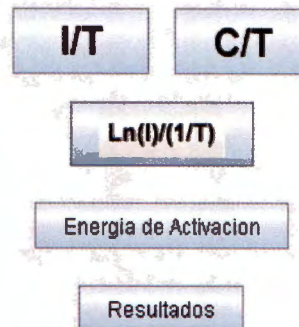


Figura 53. Leyenda del botón para la obtención de la tercer gráfica de eléctrica final

➤ Se cambió la etiqueta de las unidades de conductividad de la gráfica de conductividad contra temperatura, que se encuentra dentro del escritorio de eléctrica, de "[A]" (Figura 54) por "[S/cm]" (Figura 55).

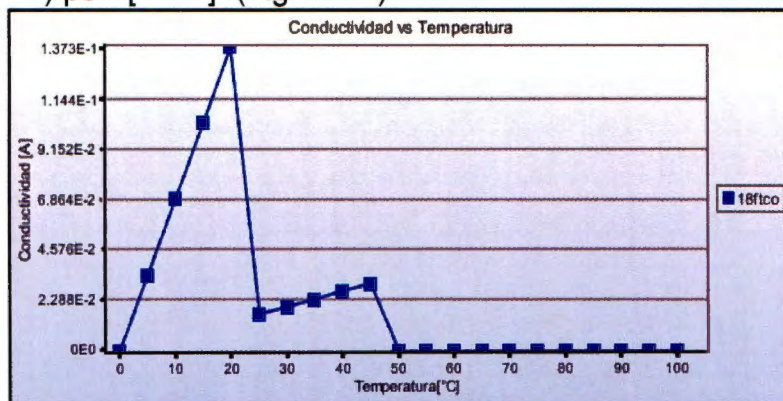


Figura 54. Unidades de conductividad equivocadas.

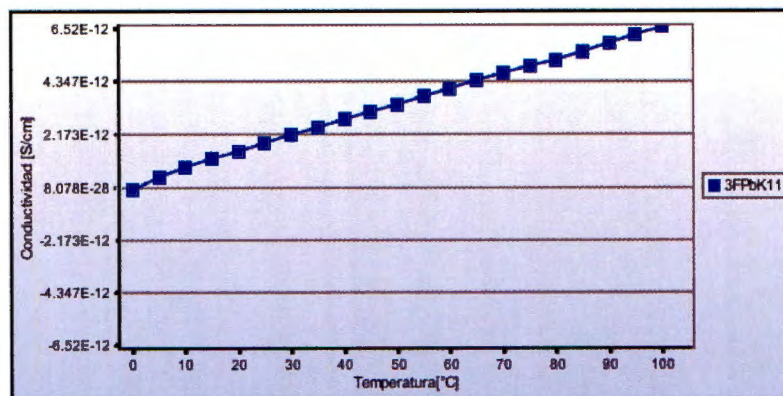


Figura 55. Unidades de conductividad corregidas.

➤ Dentro del escritorio de eléctrica, se nulificó el cuadro de texto de temperatura que se muestra en la Figura 56, el cual permitía establecer una temperatura constante para el análisis de las propiedades eléctricas del material; sin embargo se dejó como una posible expansión futura. En la Figura 57, se puede observar que únicamente se introduce el valor de un voltaje constante ya que la temperatura varía en el transcurso del proceso.

Figura 56. Temperatura o Voltaje constante

Figura 57. Voltaje constante

➤ Se quitaron los ceros de todas las casillas en los escritorios de eléctrica y óptica de la Figura 58, y se dejaron como casillas nulas (sin valor predeterminado) como se puede ver en la Figura 59, para facilitar la manipulación al usuario.

Figura 58. Cero como valor predeterminado

Figura 59. Casillas sin valor

➤ Se eliminaron los títulos a todas las gráficas con la finalidad de poder usarse para artículos. La gráfica de la Figura 60, corresponde al formato anterior con título; en la Figura 61, se muestra el formato de las gráficas en la actualidad.

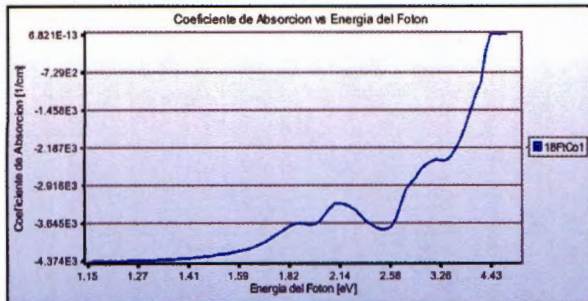


Figura 60. Ejemplo de una gráfica con título

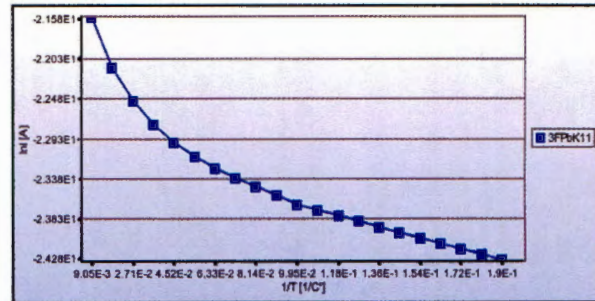


Figura 61. Ejemplo de una gráfica sin título

➤ Se cambiaron los textos que decían “número de onda” por “longitud de onda” en el escritorio IR. La Figura 62, muestra el escritorio de IR con la corrección, mostrando los campos escritos con “longitud de onda”.

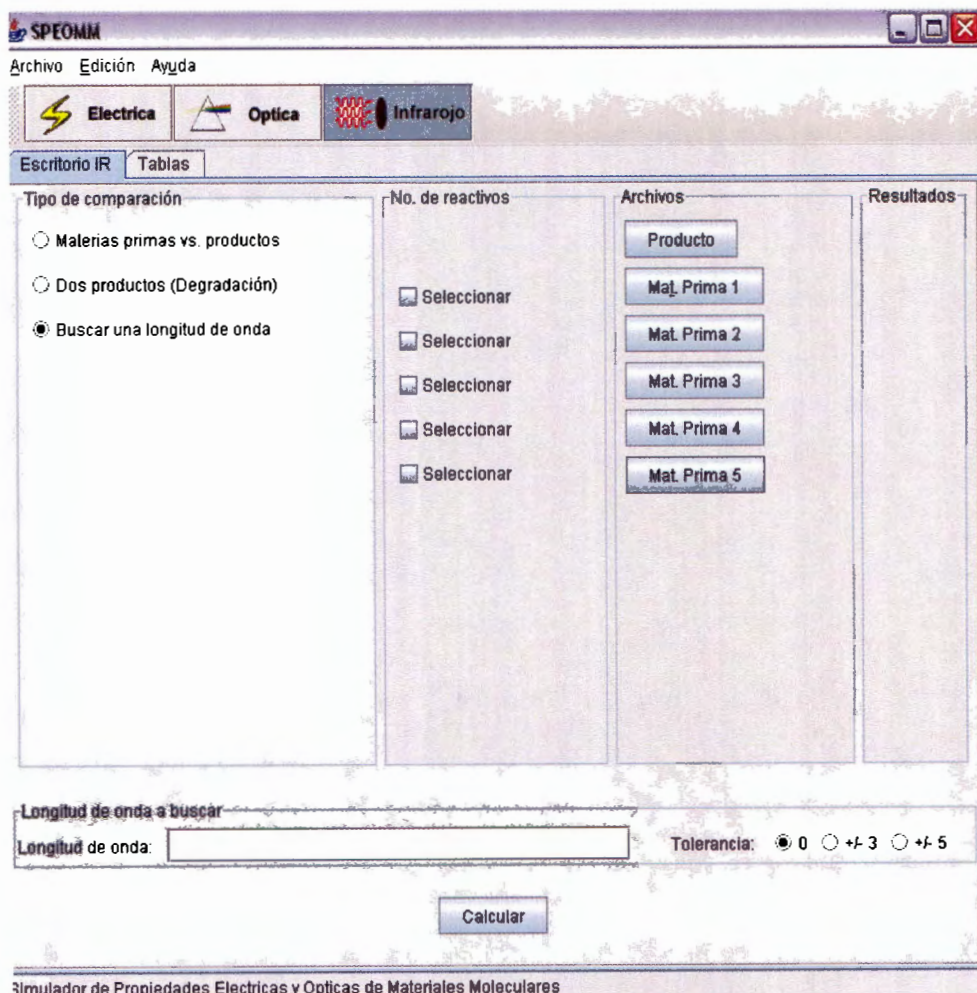


Figura 62. Escritorio IR después de la modificación

➤ En la Figura 62, se puede observar que el módulo de IR contiene una sección de Tablas igual a la de los módulos óptica y eléctrica. Sin embargo dicha sección no correspondía al módulo en cuestión, por lo que fue eliminada. El programa en la actualidad no cuenta con una sección de Tablas en el módulo de IR.

➤ Se corrigió el encabezado de las tablas de óptica, la Figura 63 muestra las tablas anteriores donde la transmitancia se encontraba en los datos de longitud de onda, y viceversa. La Figura 64 muestra la forma correcta.

	Transmitancia	Longitud de Onda
1	250	0
2	252	0
3	254	0.02
4	256	0
5	258	0
6	260	0.02
7	262	0
8	264	0.01
9	266	0
10	268	0
11	270	0
12	272	0
13	274	0
14	276	0
15	278	0.03
16	280	0.05
17	282	0
18	284	0.06
19	286	0.02
20	288	0.05
21	290	0
22	292	0.02
23	294	0

Figura 63. Tabla de óptica incorrecta

	Longitud de Onda	Transmitancia
1	0	0
2	0	0
3	0	0
4	0	0
5	0	0
6	0	0
7	0	0
8	0	0
9	0	0
10	0	0
11	0	0
12	0	0
13	0	0
14	0	0
15	0	0
16	0	0
17	0	0
18	0	0
19	0	0
20	0	0
21	0	0

Figura 64. Tabla de óptica corregida

- Se eliminó la prioridad de la caja de adquisición de datos en los escritorios de eléctrica y óptica; en la Figura 65, se muestra cómo se encima dicha herramienta sobre las gráficas analizadas. Con el fin de mandar al frente la gráfica seleccionada, se determinó la prioridad a las gráficas, como se puede observar en la Figura 66, de esta manera cuando se copia una gráfica no interfiere la imagen de dicha caja encima de la gráfica.

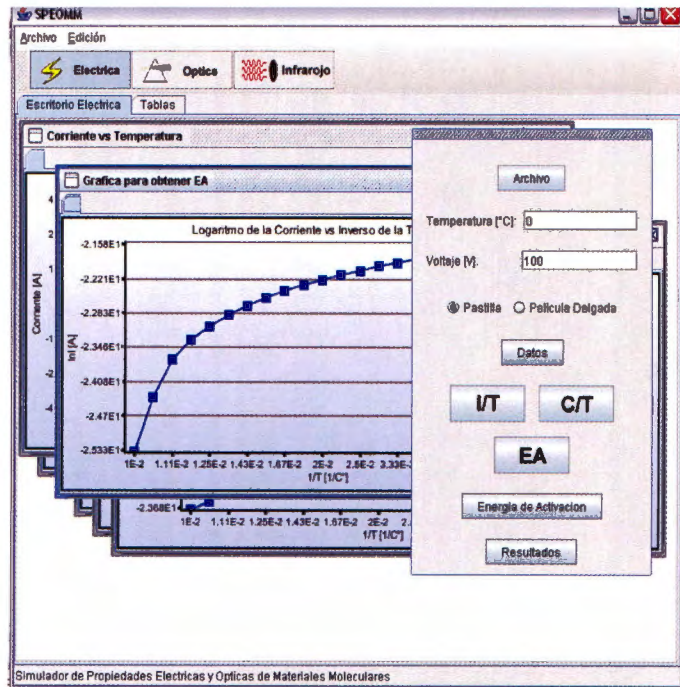


Figura 65. Prioridad de la caja de adquisición de datos

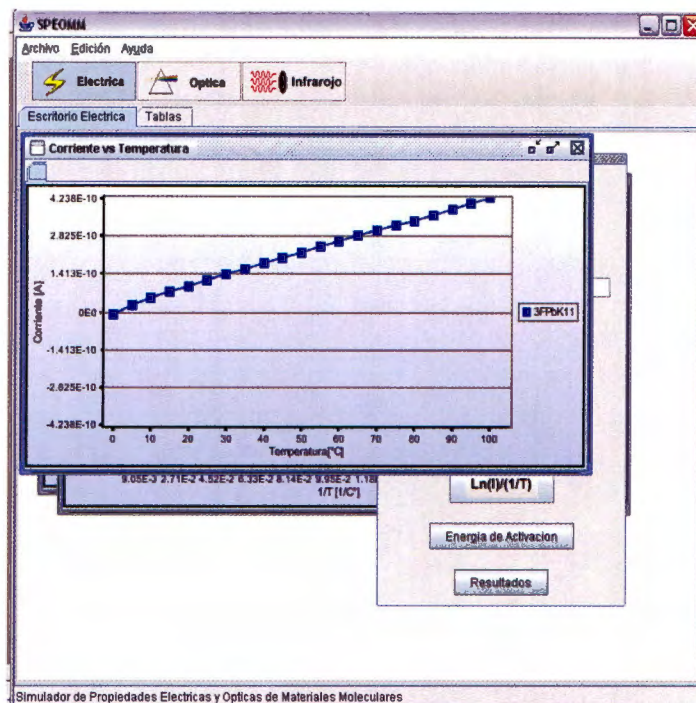


Figura 66. Prioridad de las gráficas

Capítulo 5

Implementación de SPEOMM para el desarrollo de aplicaciones prácticas de Materiales Moleculares

5.1 Análisis específico de propiedades eléctricas de los Materiales Moleculares

Para desarrollar aplicaciones con los Materiales Moleculares, resulta indispensable definir las variables que serán analizadas; dichas variables pueden ser desde comportamiento mecánico del material, propiedades ópticas que presente, propiedades químicas o bien propiedades eléctricas.

En el presente trabajo, se manejarán las propiedades eléctricas con el objetivo de resolver un problema dado mediante la aplicación de electrónica y programación; es por ello que resulta importante analizar las propiedades eléctricas que presentan los materiales.

El software de SPEOMM permite observar el comportamiento de la variación de corriente de un material cuando se incrementa su temperatura; la prueba que se les realiza a los materiales presenta una variación de temperatura de 0-100°C de manera gradual (variando 5°C), además el voltaje aplicado durante la prueba es de 200V.

Definitivamente el voltaje aplicado en la prueba es alto, por lo que resulta importante realizar pruebas a voltajes menores con el objetivo de poder realizar prácticas de electrónica con los materiales. Sin embargo es importante denotar que las aplicaciones desarrolladas en el presente trabajo tienen como base las características mencionadas anteriormente.

Realizando un análisis de la conductividad eléctrica, se observa que los materiales presentan comportamientos diferentes; es decir cada uno tiene una curva característica de respuesta de corriente cuando se varía la temperatura; esto enriquece al desarrollo de aplicaciones porque se puede escoger un material óptimo para la aplicación en cuestión. Sin embargo, hay que considerar algunos puntos importantes para el desarrollo de las mismas.

Lo primero que hay que considerar, es que las corrientes de salida son lo suficientemente pequeñas como para que no sean implementadas directamente sobre el prototipo; lo que se debe hacer es una optimización de señal, que puede realizarse mediante aplicación de circuitos electrónicos que sean capaces de convertir las señales de corriente en señales de voltaje amplificadas a los valores que se requieran o bien realizar un procesamiento de la señal en algún programa como LabView® con acceso a datos vía una tarjeta de adquisición de datos.

La otra consideración, es el valor de voltaje al que fue sometido el material, ya que esto implica que el material se comporte ante voltajes menores como las gráficas del comportamiento del material obtenidas en SPEOMM.

Finalmente, se debe considerar también el rango de temperaturas a las que se desea operar el material, ya que las pruebas realizadas presentan un rango de 0-100°C.

5.2 Justificación de implementación de Materiales Moleculares

Debido a que los MMs son materiales de tipo orgánicos, son favorables para la conservación del medio ambiente.

La inversión actual en una planta de tecnología de silicio es del orden de 2.500 millones de dólares y se estima que será de 15.000 millones en 2010; por lo cual, muy pocos países pueden producir esta tecnología. Por otro lado, de no producirse un cambio tecnológico, las limitaciones de la física y química en la tecnología actual impiden mantener el ritmo de crecimiento de la industria electrónica y por ello, de la economía mundial.

Con estos conceptos nuevos, que escalan los procesos desde abajo y partiendo del universo molecular, se vislumbra la tercera onda tecnológica moderna después de la informática y la biotecnología.

Comparando el costo unitario de un transistor de silicio con uno molecular, el de silicio es de \$3.00 mientras que se dice que uno molecular tendría costos similares a 10¢; es decir, se tendrían que comprar muchísimos transistores moleculares para llegar al precio de uno de silicio.

5.2.1 Normas Ambientales

La Comisión para la Cooperación Ambiental (CEC), constituyó en Mayo de 1999 el Instituto Internacional de Plásticos Biodegradables (BPI), con la finalidad de promover la producción y uso de plásticos verdaderamente biodegradables. Se planea realizar un proceso de certificación y logo para identificar los productos hechos con plástico biodegradable.

Tabla 7. Normas Ambientales en México⁷

Norma	Objetivo
<u>NOM-052-ECOL-93</u>	Que establece las características de los residuos peligrosos, el listado de los mismos y los límites que hacen a un residuo peligroso por su toxicidad al ambiente.
<u>NOM-053-ECOL-93</u>	Que establece el procedimiento para llevar a cabo la prueba de extracción para determinar los

⁷ http://www.semarnat.gob.mx/marco_juridico/residuos.shtml

	constituyentes que hacen a un residuo peligroso por su toxicidad al ambiente.
<u>NOM-054-ECOL-1993</u>	Que establece el procedimiento para determinar la incompatibilidad entre dos o más residuos considerados como peligrosos por la Norma Oficial Mexicana NOM-052-ECOL-1993.
<u>NOM-055-ECOL-1993</u>	Que establece los requisitos que deben reunir los sitios destinados al confinamiento controlado de residuos peligrosos, excepto de los radiactivos.
<u>NOM-056-ECOL-1993</u>	Que establece los requisitos para el diseño y construcción de las obras complementarias de un confinamiento controlado de residuos peligrosos.
<u>NOM-057-ECOL-1993</u>	Que establece los requisitos que deben observarse en el diseño, construcción y operación de celdas de un confinamiento controlado para residuos peligrosos.
<u>NOM-058-ECOL-1993</u>	Que establece los requisitos para la operación de un confinamiento controlado de residuos peligrosos.
<u>NOM-083-ECOL-1996</u>	Que establece las condiciones que deben reunir los sitios destinados a la disposición final de los residuos sólidos municipales. (Aclaración 07-marzo-1997).
<u>NOM-087-ECOL-1995.</u>	Que establece los requisitos para la separación, envasado, almacenamiento, recolección, transporte, tratamiento y disposición final de los residuos peligrosos biológico-infecciosos que se generan en establecimientos que presten atención médica. (Aclaración 12-junio-1996).
<u>NOM-133-ECOL-2000.</u>	Protección ambiental - Bifenilos policlorados (BPCs) - Especificaciones de manejo.

5.2.2 Material del recubrimiento (losetas) del trasbordador espacial

Trasbordadores espaciales: Columbia, Challenger, Discovery, Atlantis y Endeavour.

El trasbordador espacial, se compone de dos Aumentadores de Presión Sólidos del Cohete (SRBs) los cuales proporcionan el 80% del empuje para el lanzamiento; de un Tanque grande Externo (ET) el cual suministra combustible a los tres principales motores espaciales (SSMEs) durante el lanzamiento; y el orbitador, el cual aloja la tripulación y se equipa para atracar con la Estación Espacial Internacional. En cada

lanzamiento, el tanque Externo se quema en la atmósfera, el resto de los componentes se pueden reutilizar para las siguientes misiones.

La NASA, ha implementado mejoras de seguridad a los motores y al sistema de la nave, con lo que se ha triplicado la seguridad de volar en un trasbordador espacial. Entre las mejoras del sistema está el reajuste y reinstalación del Tanque Externo para reducir los riesgos de choque de hielo contra la orbitador durante el despegue.

A una altura de 45km los aumentadores de presión se separan de la cabina y el tanque externo, descendiendo con paracaídas. Cada motor del cohete contiene 450,000kg de material propulsor.

El Sistema de Protección térmica, que se encuentra en el recubrimiento del trasbordador, es diseñado para mantener una temperatura menor a 177°C en el aluminio del orbitador. En ocasiones, las superficies pueden estar expuestas hasta los 1260°C.

Las losetas de protección térmica, pueden ser de color blanco, que se encuentran en zonas con menor temperatura que el resto de la nave; y de color negro para absorber mayores temperaturas, y se ubica en las partes inferior y delantera del orbitador y en la zona delantera de las alas.

El trasbordador, también tiene un recubrimiento de carbono reforzado, que se utiliza para protección de las temperaturas más altas, se utiliza en poca cantidad ya que es un material pesado; se localiza en la punta de la nave y en los cantos frontales de las alas. En la Figura 67, se muestra la estructura de la loseta de recubrimiento, donde se puede observar la función y posición del silicio.

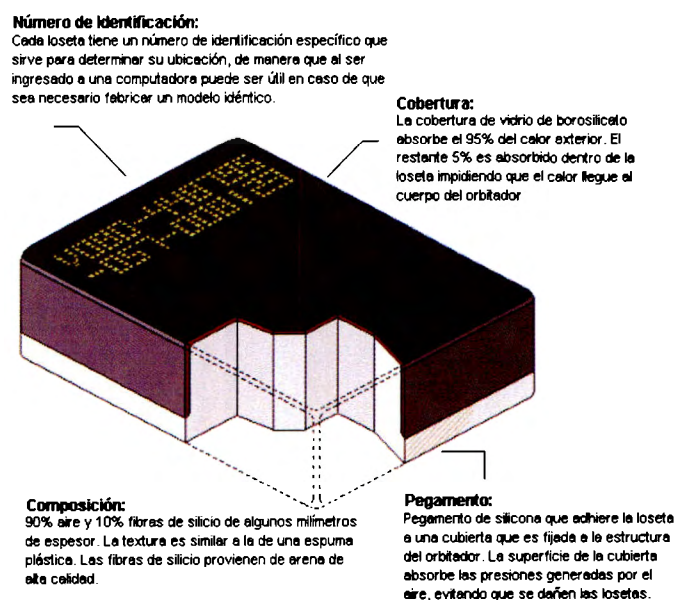


Figura 67. Estructura de la loseta de protección térmica⁸

⁸http://es.wikipedia.org/wiki/Sistema_de_protección_térmica_del_transbordador_espacial

En la actualidad, los revestimientos de losetas blancas se han ido reemplazando por materiales más flexibles y que cubren un área que equivale a 25 losetas. Un trasbordador espacial cuenta con aproximadamente 23,000 losetas de protección térmica, que son para proteger a la nave de las altas temperaturas producidas durante la reentrada, y además de las temperaturas oscilantes durante las órbitas que pueden variar de -128°C a 93°C.

Tabla 8. Datos técnicos de los componentes de un Trasbordador⁹

SRB Stats	External Tank Stats	Main Engine Stats	Orbiter Stats:
Thrust at lift-off: 2,650,000 pounds Propellant Properties: 16% Atomized aluminum powder (fuel) 69.8% Ammonium perchlorate (oxidizer) .2% Iron oxide powder (catalyst) 12% Polybutadiene acrylic acid acrylonite (binder) 2% Epoxy curing agent Weight Empty: 193,000 pounds Propellant: 1,107,000 pounds Gross: 1,300,000 pounds	Weight: Empty: 78,100 pounds Propellant: 1,585,379 pounds Gross: 1,667,677 pounds Propellant Weight * Liquid oxygen: 1,359,142 pounds Liquid hydrogen: 226,237 pounds Gross: 1,585,379 pounds Propellant Volume * Liquid oxygen tank: 143,060 gallons Liquid hydrogen tank: 383,066 gallons Gross: 526,126 gallons * Liquid oxygen is 16 times heavier than liquid hydrogen.	Thrust Sea level: 375,000 pounds Vacuum: 470,000 pounds Nominal operating time 8.5 minutes after liftoff Propellant Mixture 6 parts liquid oxygen to 1 part liquid hydrogen (by weight) Weight Approximately 6,700 pounds each Dimensions 14 feet long 7.5 feet wide at mouth of nozzle Life 7.5 hours, 55 starts	Height: (on runway) 57 feet Length: 122 feet Wingspan: 78 feet Mid Fuselage: Length: 60 feet Width: 17 feet Height: 13 feet Aft Fuselage Length: 18 feet Width: 22 feet Height: 20 feet Payload Bay Doors Length: 60 feet Diameter: 15 feet Width: 22.67 feet Surface: 1,600 feet ²

⁹ http://www.nasa.gov/mission_pages/shuttle/vehicle/index.html

5.2.2.1 Implementación de MM's

La idea es sustituir las fibras de silicio que se muestran en la Figura 67, que se encuentran en el interior del recubrimiento de las losetas térmicas, por un material molecular con la finalidad de absorber el 5% del calor que sobrepasa a la capa de vidrio, y poder dar un análisis sobre la temperatura existente en esa capa y así poder monitorear un sistema de refrigeración que se implementará en caso de ocurrir algún accidente.

5.2.3 Sobrecalentamiento del motor de un automóvil

El motor tiene un desempeño óptimo a temperaturas elevadas; a temperaturas bajas el motor es menos eficiente y contamina más. El sistema refrigerante de un coche, mostrado en la Figura 68, lo que propone es calentar rápidamente el motor para posteriormente mantenerlo a una temperatura constante.

A los 90°C ocurre el mejor desempeño del motor, realizando menores emisiones y vaporizando toda la gasolina que se encuentra en la cámara de combustión, además el aceite presenta una viscosidad ideal a esa temperatura por lo que el motor necesita un menor esfuerzo, para mover sus componentes.

Existen dos sistemas de refrigeración implementados en los autos, uno vía líquida y otro por aire, aunque este último se usaba en coches antiguos y actualmente se usa en muy pocos coches modernos. El sistema de refrigeración vía líquida, funciona mediante un líquido refrigerante que al pasar por el motor absorbe el calor del motor, posteriormente pasa por el radiador donde transfiere el calor al aire que será desechado.

El sistema debe tanto calentar el motor, como mantenerlo a temperatura constante, es por ello que un termostato debe abrir paso hacia el sistema de enfriamiento (hacia el radiador) o mantenerse cerrado para calentarlo (con ayuda de un ventilador de calor). Las temperaturas en la cámara de combustión pueden ser de 2500°C.

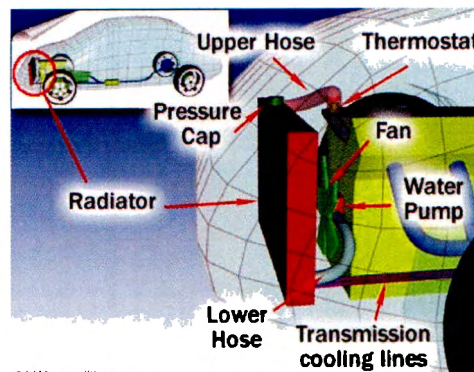


Figura 68. Sistema de enfriamiento del motor de automóvil¹⁰

¹⁰ <http://auto.howstuffworks.com/cooling-system2.htm>

Las causas por las cuales se calienta un motor de un automóvil pueden ser diversas, situaciones desde problemas con el termostato hasta problemas con la bomba de agua y el sistema en general de enfriamiento.

A continuación, se analizarán algunas de las causas más comunes y su posible detección con la implementación de los Materiales Moleculares .

5.2.3.1 Problema con el termostato

El termostato es el encargado del control de la temperatura mediante el bloqueo o liberación del líquido refrigerante del motor al radiador. Cuando el motor alcanza temperaturas superiores a los 90°C, se abre la válvula, dejando pasar el líquido refrigerante del motor al radiador.

Un indicador de que el termostato no está funcionando es que la manguera que va del radiador al motor no se calienta una vez que el motor lleva encendido un tiempo adecuado como para que empiece a calentarse dicha manguera.

5.2.3.2 Implementación de MM's

Mediante el recubrimiento de dos porciones de la manguera (cerca del motor y la otra cerca del radiador) se puede "leer" el diferencial de temperatura presente en el sistema, y en base al comportamiento normal del coche podemos determinar si el termostato está fallando o no, dándolo a conocer el la computadora central del automóvil.

5.2.3.3 Problema con el ventilador

Se puede tener problemas en los circuitos que activan el ventilador, desde el interruptor de la temperatura hasta el relevador de potencia; aunque también. Para determinar donde está el problema normalmente se debe diagnosticar con pruebas eléctricas.

5.2.3.4 Implementación de MM's

Existen MM's que al aplicarles un voltaje muy pequeño, emiten un color, tipo el funcionamiento de un LED (ej. rodopsina), esto se debe a sus propiedades ópticas. Si se implementan estos materiales pueden ser de gran utilidad para verificar que el problema se debe a esta parte del sistema refrigerante de un coche.

5.3 Relación de la virtualización de MM's con SPEOMM

Es de gran importancia mencionar que la virtualización de los materiales y el software SPEOMM realizan tareas con diferente objetivo, simular el comportamiento del material y analizar el comportamiento del material, respectivamente. Sin embargo, cabe mencionar que no son excluyentes; por el contrario, son herramientas complementarias que ayudan a entender la importancia de desarrollar proyectos con los Materiales Moleculares.

SPEOMM, permite realizar un análisis completo a cerca de propiedades eléctricas, ópticas y magnéticas, por medio de los módulos que conforman el programa. La sección de desarrollo de aplicaciones mediante la virtualización, no es más que una continuación de los resultados obtenidos por SPEOMM, ya que el análisis permite al usuario observar fácilmente el comportamiento del material concentrándose en el área de interés (eléctrica, óptica e infrarrojo).

En este trabajo, se demuestra la importancia de las propiedades eléctricas que poseen los materiales. Primero, mediante el estudio sencillo en SPEOMM que permite analizar el comportamiento del material cuando existe una diferencia de potencial entre sus terminaciones; y segundo, mediante la aplicación que se desarrollará, en este caso se refiere al problema actual del sobrecalentamiento de los motores.

De esta manera, en la Figura 69, se muestra el diagrama de flujo que representa la actividad entre los módulos de SPEOMM y virtualización de Materiales Moleculares.

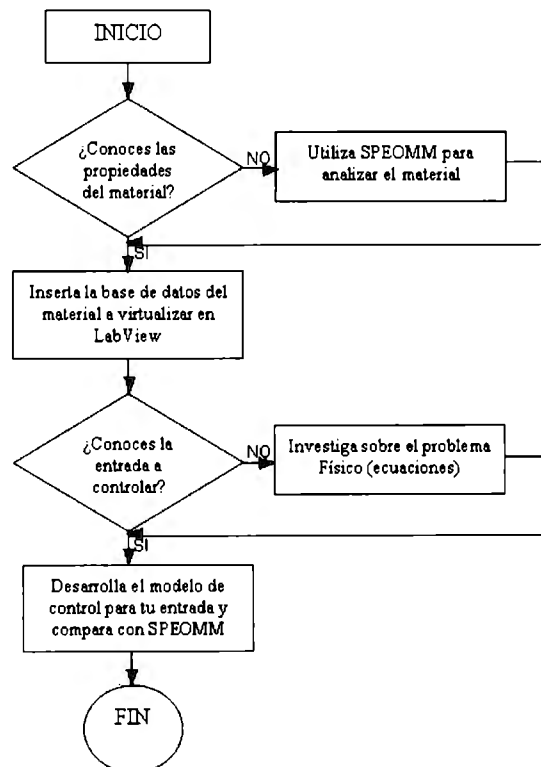


Figura 69. Diagrama de flujo para el desarrollo de una aplicación de un Material Molecular

Capítulo 6

Simulación en LabView® de las características del Material Molecular

6.1 Programa de Virtualización de MM's en LabView®

La virtualización de un Material Molecular, consiste en simular el comportamiento del material en base a una entrada específica por medio de una curva característica. En este caso la entrada es de temperatura, la salida es corriente y la curva característica corresponde a una ecuación lineal, cuadrática o de un polinomio.

En LabView® se realiza la virtualización de los MM's y los guarda en una base de datos que permite la adición de nuevos materiales en el futuro. Del mismo modo, se permite utilizar los materiales óptimos para aplicaciones específicas por medio del comportamiento físico del sistema, esto se realiza mediante una comparación de los errores medios entre la curva aproximada de cada uno de los materiales contenidos en la base de datos y la curva característica del problema a tratar. Finalmente, este programa da una salida que es digitalizada por la tarjeta de adquisición de datos, y para poderse llevar al modelo físico del problema. En la Figura 70, se explica el procedimiento de este programa.

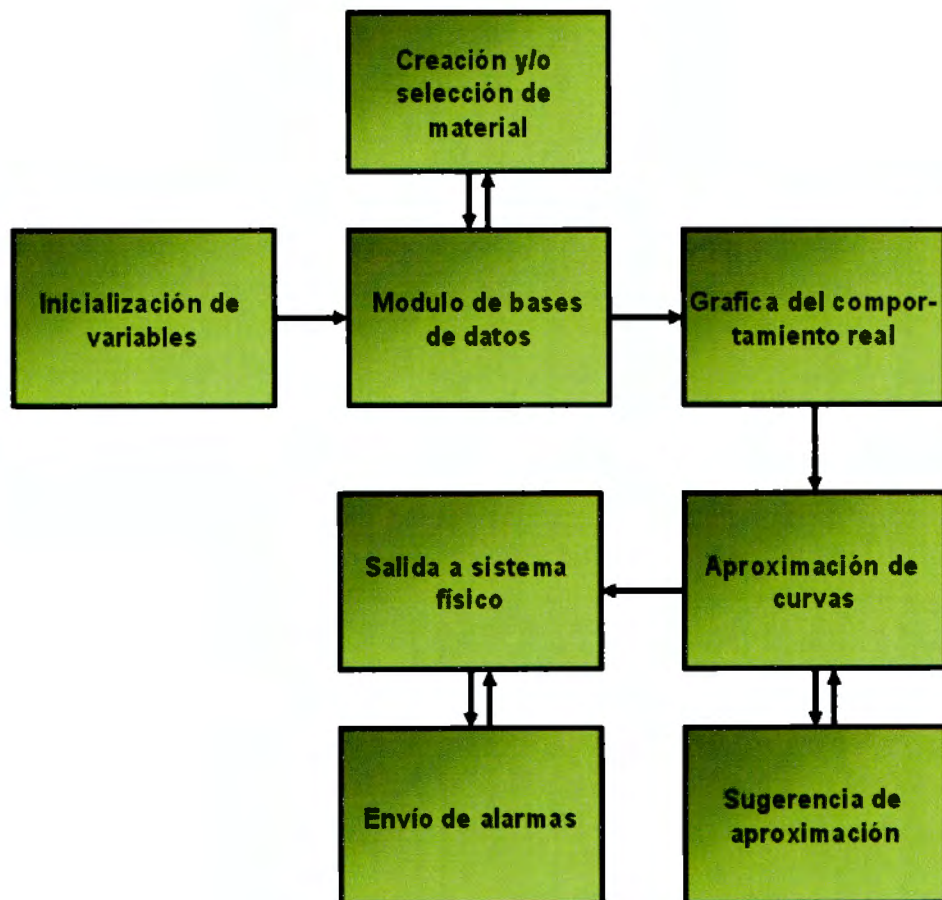


Figura 70. Diagrama de bloques del programa de simulación del MM como sensor de temperatura

Cabe mencionar, que la entrada está dada por otro programa (ubicado en una computadora diferente a la que virtualiza los materiales), que estará conectado mediante la modalidad "hardware in the loop", por lo que virtualmente se realiza en esta computadora el planteamiento físico del problema, como es el caso del sobrecalentamiento del motor; además, el programa debe contener las variables que permitan el control del mismo. Se realiza una conexión entre ambos programas con el objetivo de demostrar que puede ser monitoreado vía internet.

En la Figura 71, se muestran las comunicaciones entre computadoras para la obtención de una salida de un Material Molecular a partir de la entrada de una temperatura de un sistema físico.

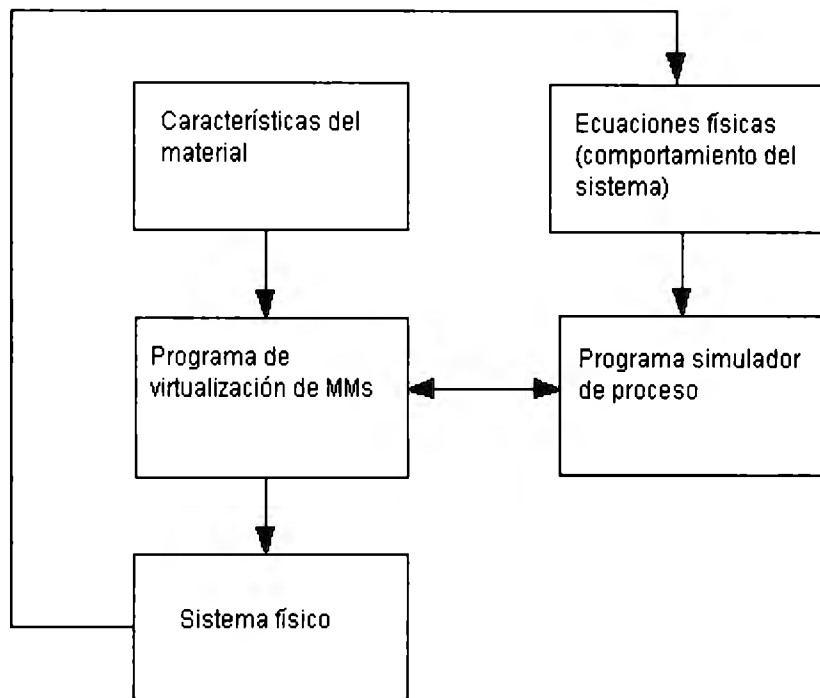


Figura 71. Diagrama de bloques del desarrollo de la aplicación

6.2 Simulación del comportamiento eléctrico del Material Molecular

Cuando se desea buscar una aplicación a los Materiales Moleculares, además de realizar un extenso análisis de propiedades de interés, se debe simular el comportamiento del mismo, con el objetivo de no desperdiciar material y poder concluir fácilmente las hipótesis elaboradas. Si se desea clasificar a los materiales en base a su funcionalidad con respecto a la solución de un sistema dado, es mejor que se simulen los comportamientos y se realicen procesos de selección de material de manera computacional, de esta manera el ahorro de tiempo, dinero y materiales es mucho mayor.

Al simular las propiedades eléctricas del material, se debe entender que no se estará trabajando físicamente con el material, además de que las condiciones de desempeño las proporciona la computadora, aspecto que difiere de la realidad en cuanto a que existen factores difíciles de controlar a nivel realidad, como pueden ser la presencia de ruido electrónico en el procesamiento de la señal, ruptura del material debido a vibraciones mecánicas, cambio de comportamiento debido a la presencia de humedad, etc.

Mientras mayor sea el análisis de estas características, mejor será la aproximación que se pueda dar en el software. Para fines prácticos, respecto a las propiedades eléctricas del material, se considera que el material se comporta de manera uniforme; es decir, se considera que no le afectan los factores anteriormente mencionados.

La importancia de simular las propiedades eléctricas para el caso del problema físico del calentamiento del motor, radica en la facilidad con la que se puede llegar a una solución para su posterior implementación.

Las variables que se simulan en el programa de simulación de material de LabView®, son la corriente y la temperatura de operación del material, dejando en claro que por las características del problema tratado, se implementan aproximaciones apropiadas, tal y como se explicará posteriormente.

El programa de simulación de material consta de varios módulos, donde se implementan bases de datos, interacciones con el usuario, cálculos de errores para aproximación, obtención de curvas aproximadas por ecuaciones características, obtención de material óptimo, "hardware in the loop" y salida real de voltaje via tarjeta de adquisición de datos de National Instruments® para el control de un sistema físico; además, se tiene un programa de simulación del sistema físico del calentamiento de un automóvil, donde se toma en cuenta el funcionamiento del termostato y el ventilador para el control de la temperatura del auto, así como el encendido y apagado del mismo y la reproducción sonora de una alarma de sobrecalentamiento.

6.3 Obtención de la ecuación característica del Material Molecular

Para la obtención de la ecuación característica de un material molecular determinado de manera simulada hay que tener los datos del comportamiento real del material. Los datos deberán presentarse en documentos de tipo ".txt", separado por tabulaciones o bien por comas, con ello se obtendrán dos columnas correspondientes a la temperatura aplicada y la respuesta de corriente del material.

Este proceso en LabView®, simplemente consta de "leer" los datos con la extensión mencionada anteriormente, aunque el programa puede volverse complejo debido a la interacción que se necesita del usuario, además de la presencia de bases de datos y procesos de selección de material.

La ecuación característica del material, nos permitirá observar el comportamiento del mismo mediante la graficación de sus variables, con el objetivo de analizar el material seleccionado y poder decidir si se quiere implementar o no el material en el problema a solucionar.

En la Figura 72, se aprecia la operación de obtención de la ecuación característica y su graficación.

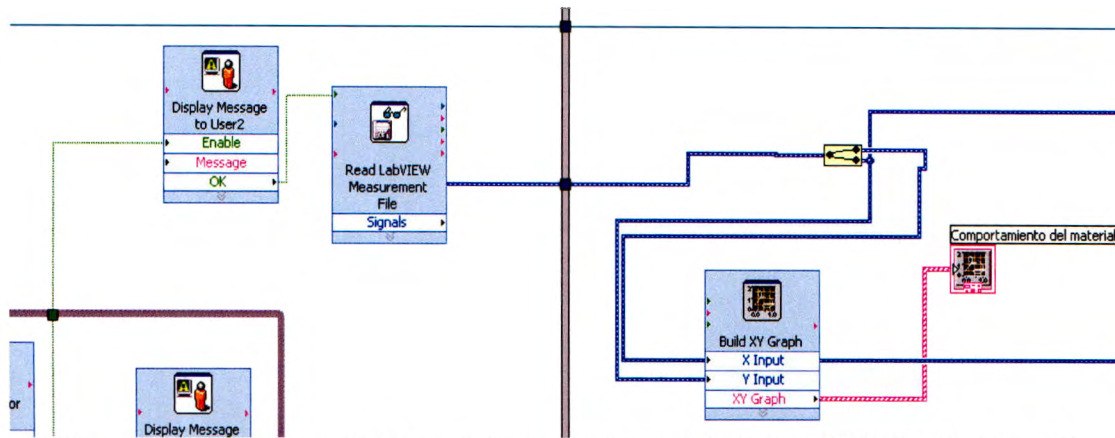


Figura 72. Diagrama de bloques de la ecuación característica del MM en LabView®

El programa realizado cuenta además con una sección de optimización de curvas, en donde el usuario puede seleccionar que tipo de aproximación desea. El objetivo de graficar el comportamiento real del material es brindar la oportunidad al usuario de determinar por criterio propio que tipo de aproximación desea realizar.

6.4 Aproximaciones de la curva característica

La intención de aproximar la curva real del comportamiento del material es poder eliminar el ruido presentado durante las pruebas de laboratorio (en donde se obtienen las curvas características de los materiales), el ruido puede deberse a una falla de conexión, a una falla de colocación del material o bien a una falla de medición. Por ello es adecuado realizar curvas de aproximación.

Además, otra ventaja que se presenta es el poder simular el comportamiento del material si se opera a rangos superiores de temperatura a los que fue sometido durante la prueba eléctrica; es decir, si se llega a someter el material a temperaturas mayores a los 100°C, podemos simular cual sería el comportamiento del mismo. De otra forma, como solo se tienen datos en cierto rango, sólo se podrían tratar problemas que operen dentro del rango de temperaturas al que fue sometido el material en el laboratorio.

Los tres tipos de aproximación que se realizaron en LabView® fueron: lineal, cuadrático y polinomial. Con el objetivo de realizar una mejor aproximación al material. Ya que

como se verá posteriormente cada una de estas aproximaciones tiene sus pros y sus contras.

El programa es capaz de brindar una sugerencia respecto a que tipo de aproximación utilizar, esto lo realiza mediante el cálculo del error cuadrático medio de las diferentes aproximaciones que se le pueden hacer a la curva. Este módulo puede observarse en la Figura 73.

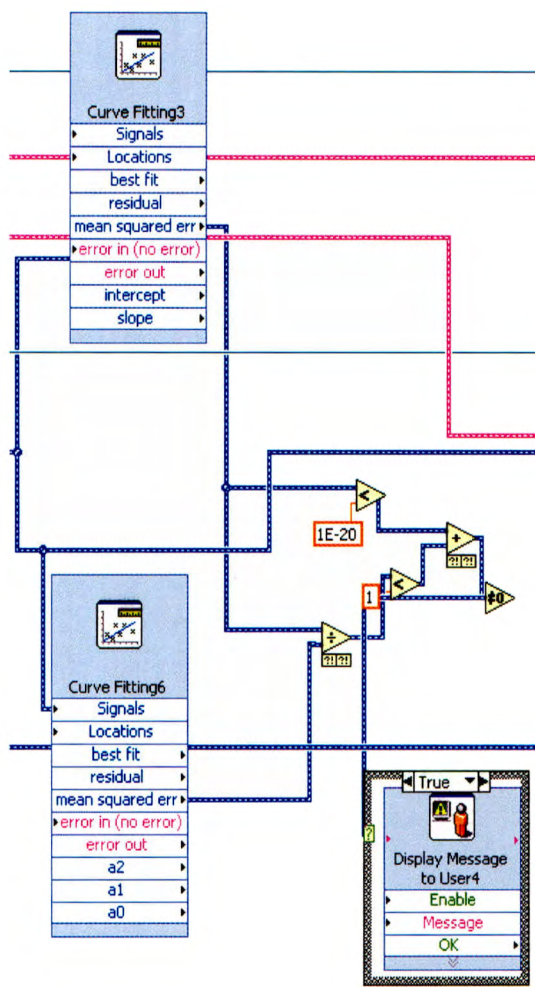


Figura 73. Diagrama de bloques del tipo de aproximación en LabView®

6.4.1 Lineal

La aproximación lineal, debe usarse cuando el material tiene un comportamiento lineal o casi lineal, de esta forma se asegura que la aproximación sustituya de manera adecuada al material y nos permitirá realizar acciones mencionadas anteriormente. Esta aproximación, es además, la más rápida en cuanto al procesamiento de señal, además de que de los materiales analizados con anterioridad es el más implementado debido a que una gran parte de los materiales presenta este comportamiento.

En la Figura 74, se puede observar como se implementan los valores determinados (pendiente y ordenada al origen) de la aproximación de la curva, que han de entrar a una fórmula constructora que recibe tanto la entrada del material (que se encuentra fuera de la estructura case), como los valores estimados por la aproximación de la curva.

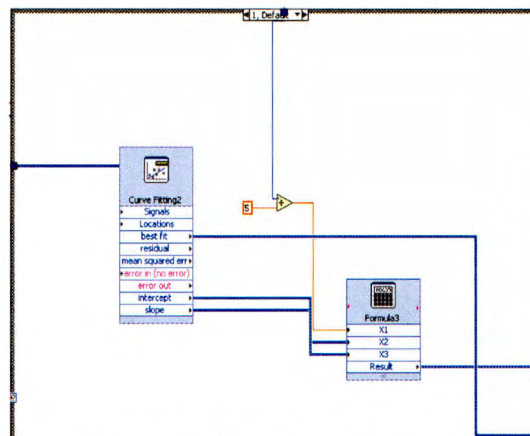


Figura 74. Aproximación lineal

6.4.2 Cuadrática

El tipo de aproximación cuadrática, sirve para aproximar aquellos materiales que nos se comportan de manera lineal y que tienen un comportamiento del tipo cuadrático, una pequeña cantidad de los materiales analizados presenta este tipo de comportamiento.

Los límites que presenta este tipo de aproximación es que el grado de error puede ser alto como para considerar mejor implementar el método de aproximación polinomial.

A diferencia de la aproximación lineal, en la aproximación cuadrática, tenemos tres coeficientes a_0 , a_1 y a_2 , de manera que se forma la ecuación cuadrática del tipo $a_2x^2 + a_1x + a_0$. Con los coeficientes se construye la ecuación mencionada donde x será la entrada del sistema. En la Figura 75, se puede ver la explicación anterior.

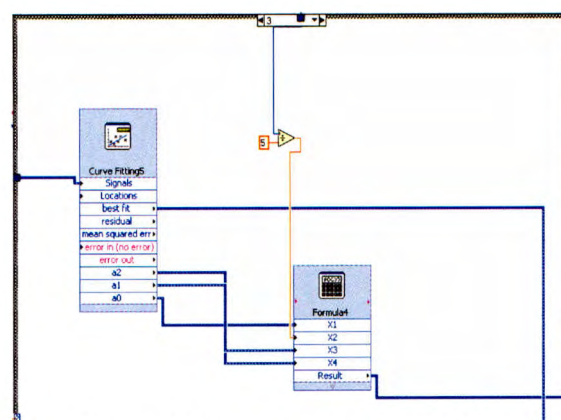


Figura 75. Aproximación cuadrática

6.4.3 Polinomial

El método polinomial propone realizar una aproximación de la curva dentro del rango establecido, por lo que únicamente se recomienda para solucionar problemas en los que se va a trabajar en rangos de temperaturas de 0-100°C, de lo contrario la aproximación será buena exclusivamente para solucionar una parte del problema.

Sin lugar a dudas, este método es el que presenta menos error cuando se trabaja en un rango de 0-100°C, debido a que el orden del polinomio (orden 10), permite que la aproximación sea casi exacta al comportamiento real del material. Para esta aproximación se obtienen los coeficientes $a_0..a_9$, b_0 . Posteriormente se insertan en la fórmula de tipo:

$a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5 + a_6x^6 + a_7x^7 + a_8x^8 + a_9x^9 + b_0x^{10}$ donde x es la entrada del sistema.

En la Figura 76, se puede observar el manejo de los coeficientes para formular la ecuación polinomial.

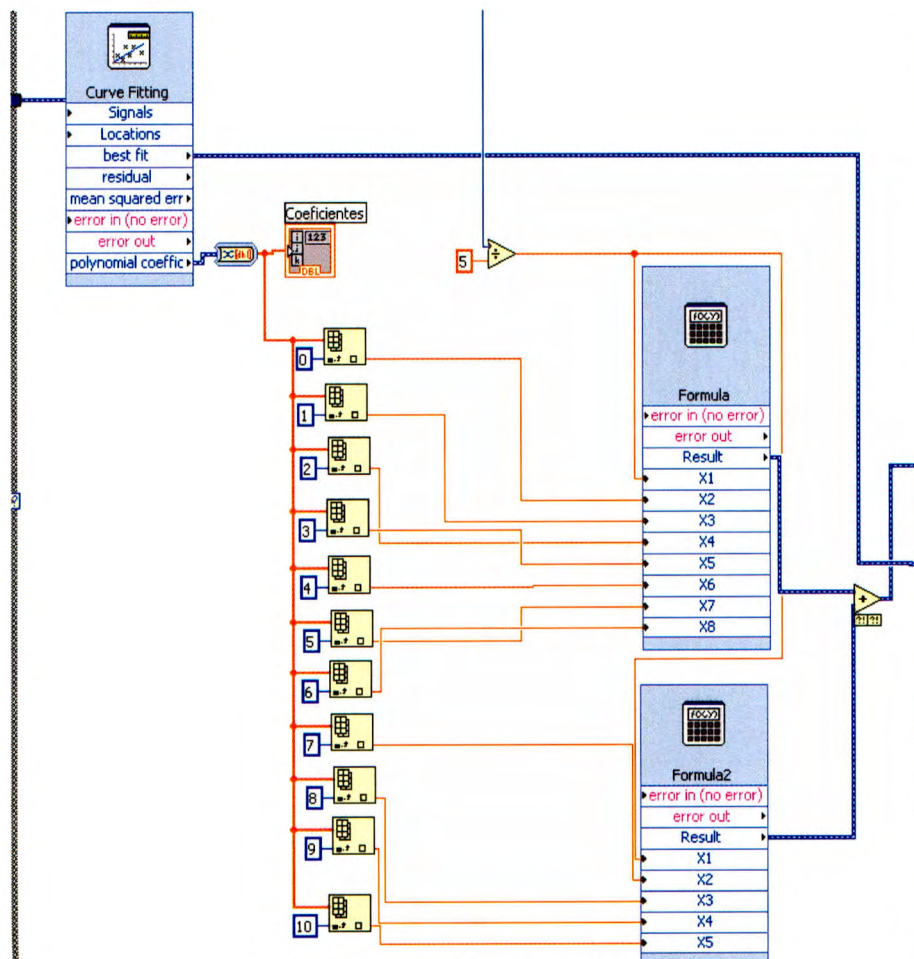


Figura 76. Aproximación polinomial

Capítulo 7

Simulación en LabView® del modelo físico del calentamiento del motor

7.1 Análisis del funcionamiento del sistema refrigerante del motor de un coche

El termostato que se encuentra incorporado en todos los motores, es una válvula que regula el paso del agua en función de la temperatura de funcionamiento. Cuando el agua del sistema no es suficientemente caliente, porque el motor no lleva bastante tiempo funcionando o porque la temperatura ambiente es muy fría, el termostato permanece cerrado y sólo entran en circulación los litros de agua de una parte del sistema. Si el agua circula muy rápido, el motor permanecerá frío, mientras que si circula despacio o no circula, el motor tenderá a calentarse.

La temperatura que alcanza la mezcla durante la combustión es de 2000°C y se ejerce una fuerza de 2 toneladas al pistón hacia abajo. Así mismo, el pistón del coche se mueve 1000 veces por minuto durante el uso normal.

Por el contrario, cuando se alcanza una temperatura aproximada de 85-90°C se abre el termostato y entran en circulación los litros del sistema, que consta del agua del radiador, de las mangueras y el agua incluida en la bomba de agua.

El principio básico del funcionamiento de un termostato es el de dilatación de una espiral metálica, que abre o cierra una válvula en función de la temperatura necesaria para esa dilatación.

En el interior, de los cilindros se alcanzan temperaturas superiores a los 700°C, por ello es necesario un sistema de refrigeración que evacue este calor, por ello los cilindros se encuentran rodeados de agua, logrando así que por diferencia de temperaturas, el agua adsorba el calor y lo disipe al medio ambiente mediante su paso por el radiador.

El radiador desempeña un papel principal en la extracción del calor del agua. Tiene dos tanques, uno en la parte superior y otro en la parte inferior. El agua corre del tanque superior al inferior por unos tubos. Los tanques están conectados al motor por unos conductos de caucho. El tanque superior está unido a la culata por una de estas conducciones y el tanque inferior está unido a un punto bajo situado sobre el bloque del motor por otro de tales conductos.

La bomba de agua está montada en la parte frontal del motor y es accionada por un cigüeñal, ayuda a aumentar la velocidad de flujo del agua, por otra parte se cuenta con un ventilador también del que depende el enfriamiento del motor. Este se encuentra atrás del radiador y en muchos coches es accionado también por la correa del motor.

En los sistemas ordinarios de refrigeración se pierde cierta cantidad de agua por evaporación, expansión (en coches antiguos) y escapes por el tapón de presión, por lo

que se precisa una reposición periódica. Sin embargo, existen hoy día coches con sistemas herméticos que solucionan el problema de pérdida por expansión, utilizando un tanque adicional de expansión

En la Figura 77, se puede observar el agua que rodea los pistones, así como el proceso de combustión por medio de una válvula de admisión que permite el paso de la mezcla, y la expulsión de gases por medio de la válvula de escape.

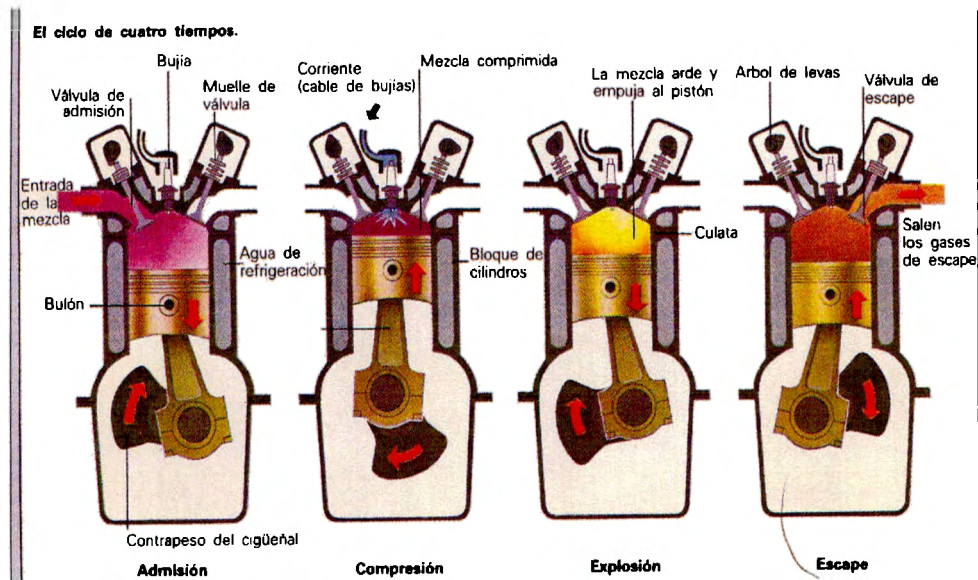


Figura 77. Operación del motor de 4 tiempos¹¹

7.2 Obtención de los parámetros ingenieriles del modelo físico

El modelo matemático del calentamiento del motor, se determinó a partir de la gráfica de la Figura 78, la cual corresponde al calentamiento de un motor eléctrico. Con ayuda de Excel® se obtuvo la ecuación característica del sistema.

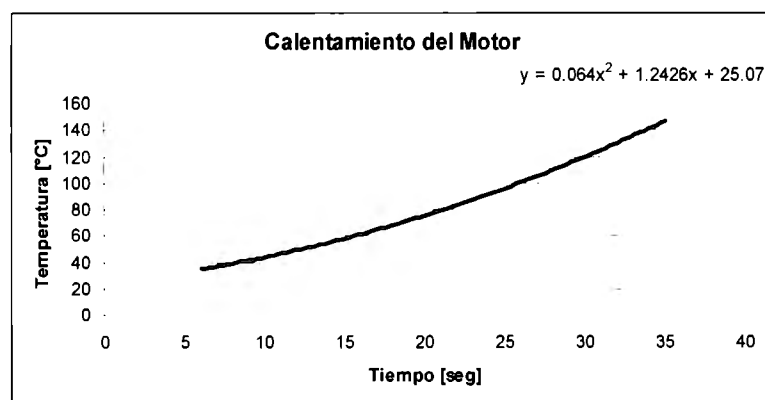


Figura 78. Curva de Calentamiento de Motor Eléctrico

¹¹ A Punto. Enciclopedia Práctica del Automóvil. Vol 2. Editorial Sarpe

La temperatura del motor encendido, se debe mantener estable a 90°C, para evitar el sobrecalentamiento; esta temperatura se mantiene por medio del sistema de refrigeración, el cual se compone del paso del anticongelante regulado por el termostato, y el aire que genera el ventilador. La ecuación 6 corresponde al calentamiento natural del motor, donde x representa el tiempo de encendido. El motor alcanza los 90°C a los 23.59 segundos, momento en el que el termostato y el ventilador se accionan para enfriar el motor.

$$T = 0.064 * X^2 + 1.2426 * X + 25.07 \quad \text{ec. [6]}$$

$$\text{Control} = 0.002712 * x^2 + 0.052653 * x - 2.75127 \quad \text{ec. [7]}$$

La ecuación 7, es un modelo de enfriamiento propuesto a partir de las soluciones de ecuaciones matemáticas, con el fin de demostrar el funcionamiento de los Materiales Moleculares al cambio de temperaturas.

7.3 Simulación del comportamiento y temperatura estable del modelo físico

El programa realizado en LabView®, para simular el comportamiento físico del motor consta de un panel frontal mostrado en la Figura 79, en el cual se puede encender el motor, y controlar el funcionamiento del termostato y el ventilador de manera manual, ya que lo que se pretende es demostrar el calentamiento del motor únicamente.



Figura 79. Panel frontal del simulador del motor

El termostato aporta 2/3 del enfriamiento del motor, mientras que el ventilador aporta 1/3, esto se determinó para fines prácticos. Es decir, si los dos funcionan el motor se mantiene a 90°C, pero si alguno de los dos falla, comenzará a calentarse a una distinta velocidad. En la Figura 80, se muestra el diagrama de bloques del programa de LabView®, el cual consta de dos fórmulas representantes del calentamiento del motor y el control para mantener la temperatura estable. Posteriormente se toman diferentes acciones dependiendo de los botones que estén encendidos en el panel frontal.

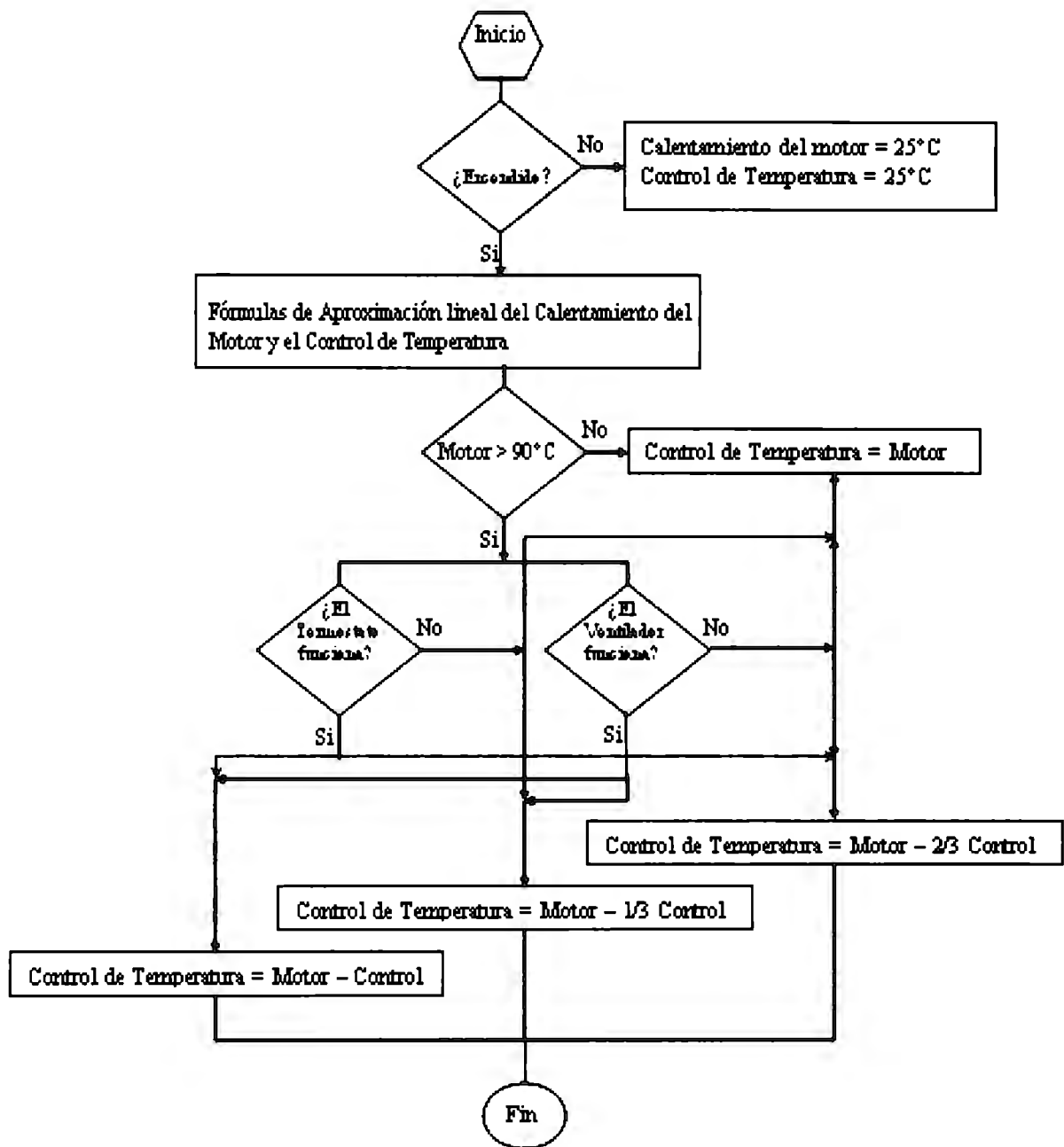


Figura 80. Diagrama de Flujo del Simulador del Modelo Físico

Capítulo 8

Base de Datos de los Materiales Moleculares

En el programa sensorial desarrollado en LabView® se tiene una parte que trabaja con bases de datos en excel, de manera que se permite acceder con facilidad y manipular los datos que se tienen en las tablas.

Cada hoja de trabajo corresponde a los datos que se tienen de un material molecular en específico, para el problema de refrigeración del automóvil, las columnas corresponden a las variables de temperatura y corriente.

En la primer hoja de trabajo deberán ir los datos del problema, ya que a esa hoja no se puede acceder mas que desde excel, y el objetivo es que el problema quede grabado en la primer hoja de trabajo.

La sección de bases de datos en MS EXCEL®, funciona con la herramienta de "report generation" de LabView®, dicha herramienta se considera avanzada debido a que no viene con el paquete estudiantil en instalación típica, sino que es una de las expansiones que se le pueden dar al programa.

La base de datos debe contener dos fases, la fase de entrada, en donde se pide al usuario que inserte un archivo con datos y la fase de salida, en donde se pide al usuario que escoja un índice acorde a las hojas de trabajo. De esta forma si se quiere obtener el tercer material guardado se deberá indicar que el índice tiene un valor de 3.

Para facilitar el manejo de la base de datos, el usuario puede revisar la base mediante un menú sencillo correspondiente al panel frontal del programa, como se puede ver en la Figura 81, se tiene un scroll menú para la sección de bases de datos, un boton de seguir para seleccionar el material y el nombre del material seleccionado.

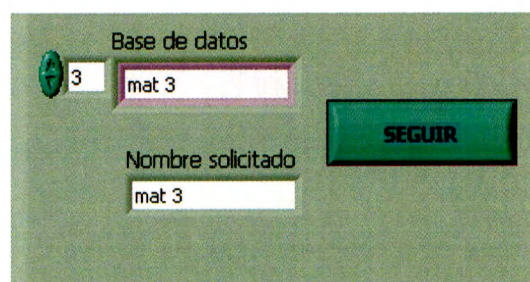


Figura 81. Panel Frontal del manejo de Bases de Datos

Una vez seleccionado el material, los datos de temperatura y corriente pasarán por la sección de aproximación de curvas para finalmente dar una salida real a nivel físico.

Capítulo 9 “Hardware in the Loop”

Para establecer una comunicación entre computadoras, se puede realizar de diversas formas; ya sea mediante la conexión via infrarroja, via mail, UDP o bien TCP/IP. Debido a la facilidad para el usuario se recomienda una comunicación vía TCP/IP, en donde simplemente se tiene que especificar el IP de las computadoras que interactúan. Sin embargo cualquiera de las opciones anteriores es válida.

En los programas realizados en LabView® se implementó TCP/IP, logrando que se comuniquen las computadoras y que se establezca una conexión entre ellas en todo momento.

El diagrama de bloques de la Figura 82 muestra el funcionamiento del hardware in the loop para el sistema del calentamiento del motor de un automóvil.

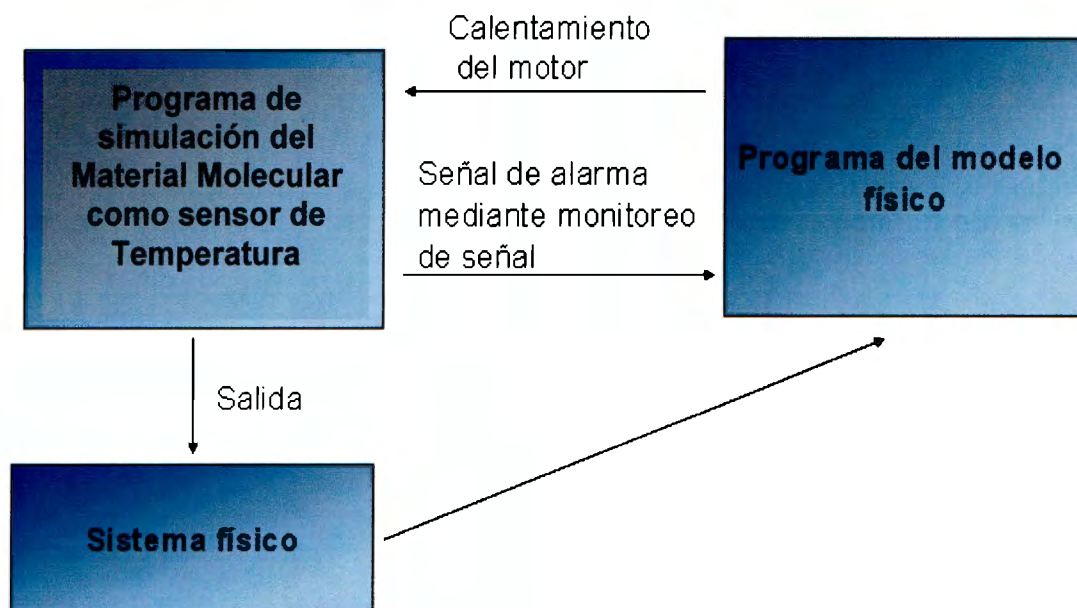


Figura 82. Diagrama de bloques de “Hardware in the Loop”

Donde una computadora hace el análisis y monitoreo de la señal recibida del calentamiento del motor y la otra computadora recibe una señal de alarma simulando el tablero (y funcionamiento) de un automóvil.

El programa sensorial da salida a un sistema físico que puede ser un termostato electrónico, un termostato electro-mecánico. Para fines de prototipo y observar el funcionamiento del mismo, se puede implementar un circuito de circulación de agua con una bomba que actúe a los diferentes niveles de voltaje que reciba.

9.1 Conexión TCP/IP

La conexión TCP/IP en LabView®, es de fácil implementación, ya que como se dijo con anterioridad basta con especificar el IP de la computadora que envía los datos, además de establecer un canal de envío. Los datos se envían en bytes, por lo que resulta indispensable indicar la cantidad de bytes escritos para que la máquina receptora pueda leer la cantidad de bytes que se le indiquen. De este modo, primero se envía un dato indicando la cantidad de bytes a leer y posteriormente se envía el dato. De manera análoga, la computadora receptora primero interpreta el número de bytes que debiera obtener y posteriormente leera los datos correspondientes.

Los datos enviados y recibidos serán de tipo string, por lo que será necesario convertir a tipo de dato numérico en caso de que sea conveniente. Para el caso del problema del motor, se envía la temperatura a la que se encuentra el motor, por lo que el tipo de dato a leer y escribir sera double y necesitará que se convierta a tipo string para enviar y convertir de string a double para leer y manipular.

La Figura 83, muestra la forma en como se debe escribir a la red vía TCP/IP, indicando primero el numero de bytes por recibir y posteriormente mandar el dato

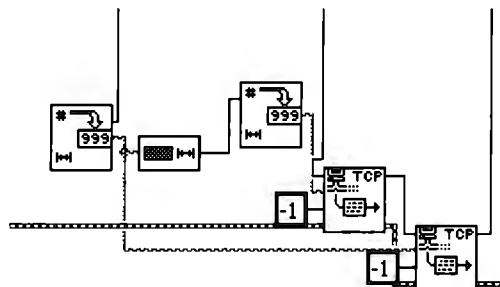


Figura 83. Conexión en LabView® para escribir en la red

La Figura 84 muestra como se debe leer de la red por conexión TCP/IP, obteniendo primero el número de bytes por leer y posteriormente el dato a recibir.

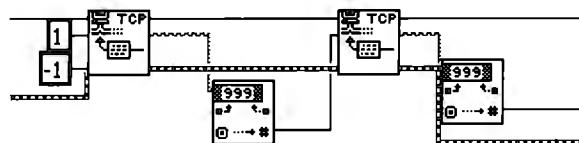


Figura 84. Conexión en LabView® para leer de la red

La velocidad de transmisión dependerá de la red a la que se esté conectado. Sin embargo esto no es un límite para llevar a cabo la simulación en esta modalidad. Se recomienda utilizar un cable UTP cruzado entre computadoras y seleccionar un IP estático para mejorar la velocidad de transferencia.

La idea en sistemas reales es que el tiempo de transmisión sea mínimo, con el objetivo de mejorar el rendimiento del sistema.

9.2 Interacción entre el modelo físico y el sistema sensorial

Una vez que se ha comprendido el funcionamiento adecuado de hardware in the loop y el modelo TCP/IP que se debe seguir para la transferencia de datos, se debe analizar que datos se van a enviar y recibir en cada una de las máquinas.

La computadora dedicada al modelo físico del sistema de calentamiento del motor de un automóvil, presenta dos switches que activan o inhiben el funcionamiento del ventilador y del termostato del sistema de refrigeración. La justificación de ello es la suposición de que se estropea o bien el termostato o bien el ventilador. Cada uno de estos elementos ayudará en un porcentaje determinado (66% el termostato y 33% el ventilador) a enfriar el anticongelante que ha de pasar por el radiador siendo enfriado por el ventilador y también pasará por las venas internas del motor, siendo el termostato quien controla el flujo del anticongelante.

También tendrá un sistema de encendido y apagado que indicará al sistema sensorial el momento de arranque del motor; por definición se ha puesto que el motor se encuentra a 25°C, que corresponde a la temperatura ambiental.

Una vez teniendo en cuenta estas características de funcionamiento, el modelo físico envía los datos respectivos al calentamiento del motor, siendo el sistema sensorial el que recibe estos datos, los monitorea realizando cálculos para evitar una avería en el motor.

En caso de que la temperatura sobrepase los 100°C, el sistema sensorial se hará cargo de enviar una alerta al modelo físico, dicha alerta se activará con un sonido especial indicando que hay sobrecalentamiento y que se debe apagar el coche.

El sistema sensorial actuará directamente en el modelo físico, tratando de evitar el calentamiento del coche debido al sistema electro-mecánico propuesto. Sin embargo, en caso de que algo llegase a fallar, se debe avisar al usuario para que tome las medidas necesarias.

Capítulo 10

Conclusiones

Los programas de análisis de propiedades ópticas y eléctricas, deben de ser amigables para el usuario de tal forma que se entienda el completo funcionamiento de cada una de las partes que comprende el programa. Es por ello que se debe de realizar alguna actividad como la que justifica este proyecto, para que el software pueda ser utilizado por cualquier persona.

SPEOMM es un programa que se encuentra completamente validado y modificado garantizando al usuario calidad en los resultados. Además contiene tutoriales de cada uno de los módulos para usuarios principiantes.

SPEOMM es un programa robusto que se puede correr desde cualquier plataforma, y además se presenta en forma de Applet y como programa, con la finalidad de poder subirse a un servidor.

Los productos que se generan en la industria deben de pasar por un proceso de control de calidad; los programas computacionales deben de ser probados y validados tanto por personas especializadas en el tema en cuestión como por personas que posean conocimientos mínimos, de esta forma se puede concluir que cualquier persona será capaz de manejar el programa. Si se posee un conocimiento básico en el área, el usuario puede comprobar que el apoyo de un software, como el realizado en este proyecto brinda mayor exactitud en los resultados, así como ahorro de tiempo en el análisis de los materiales, permitiendo al usuario enfocarse a otros aspectos de estudio e investigación.

Por otra parte, todos los programas que se realicen a nivel industrial deben de tener un objetivo, el cual es ayudar al desarrollo tecnológico, por ello, mediante SPEOMM se busca facilitar e incitar a la búsqueda de aplicaciones para los materiales moleculares, ya que como se vio a lo largo del trabajo, poseen propiedades distintivas que pueden aprovecharse al máximo desarrollando así nuevos proyectos, como es el caso del proyecto del termostato electrónico propuesto.

LabView® es un software, que permite desarrollar una plataforma sobre la cual se pueden edificar aplicaciones para los materiales moleculares. Sin embargo hay que denotar que no cubre todas las aplicaciones que se puedan desarrollar, como es el caso de aplicación de las propiedades fotocromáticas de los materiales moleculares.

Teniendo ambos programas (LabView® y SPEOMM) para el desarrollo de aplicaciones, su justificación y comprensión resulta sencillo.

Referencias

- 1) Universidad de Antioquia. *Estado del Arte Unidad 4* [online]. Colombia, 2003. [citado en enero 2006]. Página web: <http://docencia.udea.edu.co/bibliotecologia/seminario-estudios-usuario/unidad4/estado_arte.html>
- 2) Duran López Rodrigo, Barreta Marcelo López. Proyecto de Ingeniería Computacional. Simulación de propiedades eléctricas y ópticas en Materiales Moleculares (SPEOM). Tecnológico de Monterrey. ISE2005-105.
- 3) Sámano Hernández Angélica, Pérez Gamboa Luis, Castañeta Briseno Carlos Daniel. Electrosíntesis y caracterización de Materiales Moleculares a partir del ferrocenil carbono de fisher. Aplicaciones y tendencia hacia los nanomateriales. ITESM 2005.
- 4) Concepción Rovira Angulo. Conductores y Superconductores Moleculares. Artículo. CSIC.
- 5) Javier Garin. Tetratrafalvalenos: diseño molecular y control de propiedades. Artículo de la Universidad de Zaragoza - CSIC.
- 6) Carlos J Gómez García. Medida de las propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas en conductores moleculares Artículo de la Universidad de Valencia
- 7) NASA. *Space Shuttle Vehicle Structure* [online]. USA. [cited September, 2006]. Web Page: <http://www.nasa.gov/mission_pages/shuttle/vehicle/index.html>
- 8) Wikipedia La Enciclopedia Libre. *Sistema de protección térmica del trasbordador espacial* [online]. Modificada 18 de enero del 2006. [citado en septiembre 2006]. Página web: <http://es.wikipedia.org/wiki/Sistema_de_protección_térmica_del_transbordador_espacial>
- 9) Coordinación General Jurídica. *Normas oficiales mexicanas ecológicas: residuos, sólidos municipales y biológico infeccioso* [online]. México, D.F. [citado en septiembre 2006]. Página web: <http://www.semarnat.gob.mx/marco_juridico/residuos.shtml>
- 10) PROFEPA. *La ley al servicio de la naturaleza* [online]. México, D.F. 2006 [citado en septiembre 2006]. Página web: <<http://www.profepa.gob.mx/Profepa/Juridico/DelitosAmbientales/>>
- 11) HowStuffWorks, Inc. *How Car Cooling System Work* [online]. 1998-2006. Web Page: <<http://auto.howstuffworks.com/cooling-system2.htm>>
- 12) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). *Nanotecnologías* [online]. Buenos Aires, Argentina. Junio 2005. Página Web: <http://www.conicet.gov.ar/becas/archivos_gral/2005/listado_areas_vacancia/nanotecnologias.doc>
- 13) R. Durán. *Nanomáquinas y Nanorobots* [online]. Internet Electronic Journal, Nanociencia et Moetrónica, vol. 1. Textos Científicos. Puebla, México. Diciembre 2003. Página Web: <<http://www.revista-nanociencia.ece.buap.mx/arti9.pdf#search='costos%20materiales%20moleculares'>>
- 14) Tomás Torres Cebada. *Nanoquímica y nanotecnología: nuevos materiales, polímeros y máquinas moleculares* [online]. Universidad Autónoma da Madrid. Página Web: <<http://www.encuentros-multidisciplinares.org/Revistanº12/Nº%2012%20Tomás%20Torres.htm>>
- 15) A Punto. Enciclopedia Práctica del Automóvil. Vol 1. Editorial Sarpe
- 16) A Punto. Enciclopedia Práctica del Automóvil. Vol 2. Editorial Sarpe

ANEXO 1. Tablas de datos de propiedades eléctricas de MMs

Las tablas a continuación muestran los datos de SPEOMM de los diferentes materiales analizados, así como los datos de conductividad calculados por MS EXCEL®, mostrando la relación de unidades.

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond ¹² Pastilla (S/mm)	Cond Pelicula (S/cm)	Cond ¹³ Pelicula (S/mm)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK11									
1	0.0	-5.86E-12	-1.706E13	-9.015E-14	-9.02E-15	-1.736E-10	-1.74E-11	-2.533E1	∞
2	5.0	2.668E-11	3.748E12	4.105E-13	4.10E-14	7.905E-10	7.91E-11	-2.435E1	2E-1
3	10.0	5.261E-11	1.901E12	8.094E-13	8.09E-14	1.559E-9	1.56E-10	-2.367E1	1E-1
4	15.0	7.62E-11	1.312E12	1.172E-12	1.17E-13	2.258E-9	2.26E-10	-2.33E1	6.667E-2
5	20.0	9.531E-11	1.049E12	1.466E-12	1.47E-13	2.824E-9	2.82E-10	-2.307E1	5E-2
6	25.0	1.176E-10	8.503E11	1.809E-12	1.81E-13	3.484E-9	3.48E-10	-2.286E1	4E-2
7	30.0	1.396E-10	7.163E11	2.148E-12	2.15E-13	4.136E-9	4.14E-10	-2.269E1	3.333E-2
8	35.0	1.603E-10	6.238E11	2.466E-12	2.47E-13	4.75E-9	4.75E-10	-2.255E1	2.857E-2
9	40.0	1.806E-10	5.537E11	2.778E-12	2.78E-13	5.351E-9	5.35E-10	-2.243E1	2.5E-2
10	45.0	2.022E-10	4.946E11	3.111E-12	3.11E-13	5.991E-9	5.99E-10	-2.232E1	2.222E-2
11	50.0	2.21E-10	4.525E11	3.4E-12	3.40E-13	6.548E-9	6.55E-10	-2.223E1	2E-2
12	55.0	2.42E-10	4.132E11	3.723E-12	3.72E-13	7.17E-9	7.17E-10	-2.214E1	1.818E-2
13	60.0	2.592E-10	3.858E11	3.988E-12	3.99E-13	7.68E-9	7.68E-10	-2.207E1	1.667E-2
14	65.0	2.818E-10	3.549E11	4.335E-12	4.34E-13	8.35E-9	8.35E-10	-2.199E1	1.538E-2
15	70.0	3.009E-10	3.323E11	4.629E-12	4.63E-13	8.916E-9	8.92E-10	-2.192E1	1.429E-2
16	75.0	3.219E-10	3.107E11	4.952E-12	4.95E-13	9.538E-9	9.54E-10	-2.186E1	1.333E-2
17	80.0	3.358E-10	2.978E11	5.166E-12	5.17E-13	9.95E-9	9.95E-10	-2.181E1	1.25E-2
18	85.0	3.599E-10	2.779E11	5.537E-12	5.54E-13	1.066E-8	1.07E-09	-2.175E1	1.176E-2
19	90.0	3.805E-10	2.628E11	5.854E-12	5.85E-13	1.127E-8	1.13E-09	-2.169E1	1.111E-2
20	95.0	4.027E-10	2.483E11	6.195E-12	6.20E-13	1.193E-8	1.19E-09	-2.163E1	1.053E-2
21	100.0	4.238E-10	2.36E11	6.52E-12	6.52E-13	1.256E-8	1.26E-09	-2.158E1	1E-2
13FPbK12									
1	0.0	5.188E-11	1.928E12	7.982E-13	7.98E-14	1.537E-9	1.54E-10	-2.368E1	∞
2	5.0	5.264E-11	1.9E12	8.098E-13	8.10E-14	1.56E-9	1.56E-10	-2.367E1	2E-1
3	10.0	5.414E-11	1.847E12	8.329E-13	8.33E-14	1.604E-9	1.60E-10	-2.364E1	1E-1
4	15.0	5.475E-11	1.826E12	8.423E-13	8.42E-14	1.622E-9	1.62E-10	-2.363E1	6.667E-2
5	20.0	5.687E-11	1.758E12	8.749E-13	8.75E-14	1.685E-9	1.69E-10	-2.359E1	5E-2
6	25.0	5.791E-11	1.727E12	8.909E-13	8.91E-14	1.716E-9	1.72E-10	-2.357E1	4E-2
7	30.0	5.924E-11	1.688E12	9.114E-13	9.11E-14	1.755E-9	1.76E-10	-2.355E1	3.333E-2
8	35.0	5.977E-11	1.673E12	9.195E-13	9.20E-14	1.771E-9	1.77E-10	-2.354E1	2.857E-2
9	40.0	6.051E-11	1.653E12	9.309E-13	9.31E-14	1.793E-9	1.79E-10	-2.353E1	2.5E-2

¹² Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

¹³ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond ¹⁴ Pastilla (S/mm)	Cond Pelicula (S/cm)	Cond ¹⁵ Película (S/mm)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK12									
10	45.0	6.201E-11	1.613E12	9.54E-13	9.54E-14	1.837E-9	1.84E-10	-2.35E1	2.222E-2
11	50.0	6.421E-11	1.557E12	9.878E-13	9.88E-14	1.903E-9	1.90E-10	-2.347E1	2E-2
12	55.0	6.483E-11	1.542E12	9.974E-13	9.97E-14	1.921E-9	1.92E-10	-2.346E1	1.818E-2
13	60.0	6.63E-11	1.508E12	1.02E-12	1.02E-13	1.964E-9	1.96E-10	-2.344E1	1.667E-2
14	65.0	6.699E-11	1.493E12	1.031E-12	1.03E-13	1.985E-9	1.98E-10	-2.343E1	1.538E-2
15	70.0	6.758E-11	1.48E12	1.04E-12	1.04E-13	2.002E-9	2.00E-10	-2.342E1	1.429E-2
16	75.0	6.796E-11	1.471E12	1.046E-12	1.05E-13	2.014E-9	2.01E-10	-2.341E1	1.333E-2
17	80.0	7.03E-11	1.422E12	1.082E-12	1.08E-13	2.083E-9	2.08E-10	-2.338E1	1.25E-2
18	85.0	7.119E-11	1.405E12	1.095E-12	1.10E-13	2.109E-9	2.11E-10	-2.337E1	1.176E-2
19	90.0	7.354E-11	1.36E12	1.131E-12	1.13E-13	2.179E-9	2.18E-10	-2.333E1	1.111E-2
20	95.0	7.246E-11	1.38E12	1.115E-12	1.11E-13	2.147E-9	2.15E-10	-2.335E1	1.053E-2
21	100.0	7.465E-11	1.34E12	1.148E-12	1.15E-13	2.212E-9	2.21E-10	-2.332E1	1E-2
13FPbK13									
1	0.0	4.992E-11	2.003E12	7.68E-13	7.68E-14	1.479E-9	1.48E-10	-2.372E1	∞
2	5.0	5.777E-11	1.731E12	8.888E-13	8.89E-14	1.712E-9	1.71E-10	-2.357E1	2E-1
3	10.0	5.956E-11	1.679E12	9.163E-13	9.16E-14	1.765E-9	1.76E-10	-2.354E1	1E-1
4	15.0	6.428E-11	1.556E12	9.889E-13	9.89E-14	1.905E-9	1.90E-10	-2.347E1	6.667E-2
5	20.0	6.734E-11	1.485E12	1.036E-12	1.04E-13	1.995E-9	2.00E-10	-2.342E1	5E-2
6	25.0	7.064E-11	1.416E12	1.087E-12	1.09E-13	2.093E-9	2.09E-10	-2.337E1	4E-2
7	30.0	7.416E-11	1.348E12	1.141E-12	1.14E-13	2.197E-9	2.20E-10	-2.332E1	3.333E-2
8	35.0	7.7E-11	1.299E12	1.185E-12	1.18E-13	2.281E-9	2.28E-10	-2.329E1	2.857E-2
9	40.0	8.119E-11	1.232E12	1.249E-12	1.25E-13	2.406E-9	2.41E-10	-2.323E1	2.5E-2
10	45.0	8.661E-11	1.155E12	1.332E-12	1.33E-13	2.566E-9	2.57E-10	-2.317E1	2.222E-2
11	50.0	8.93E-11	1.12E12	1.374E-12	1.37E-13	2.646E-9	2.65E-10	-2.314E1	2E-2
12	55.0	9.344E-11	1.07E12	1.438E-12	1.44E-13	2.769E-9	2.77E-10	-2.309E1	1.818E-2
13	60.0	9.808E-11	1.02E12	1.509E-12	1.51E-13	2.906E-9	2.91E-10	-2.305E1	1.667E-2
14	65.0	1.007E-10	9.93E11	1.549E-12	1.55E-13	2.984E-9	2.98E-10	-2.302E1	1.538E-2
15	70.0	1.08E-10	9.259E11	1.662E-12	1.66E-13	3.2E-9	3.20E-10	-2.295E1	1.429E-2
16	75.0	1.102E-10	9.074E11	1.695E-12	1.70E-13	3.265E-9	3.27E-10	-2.293E1	1.333E-2
17	80.0	1.158E-10	8.636E11	1.782E-12	1.78E-13	3.431E-9	3.43E-10	-2.288E1	1.25E-2
18	85.0	1.211E-10	8.258E11	1.863E-12	1.86E-13	3.588E-9	3.59E-10	-2.283E1	1.176E-2
19	90.0	1.22E-10	8.197E11	1.877E-12	1.88E-13	3.615E-9	3.61E-10	-2.283E1	1.111E-2
20	95.0	1.318E-10	7.587E11	2.028E-12	2.03E-13	3.905E-9	3.91E-10	-2.275E1	1.053E-2
21	100.0	1.411E-10	7.087E11	2.171E-12	2.17E-13	4.181E-9	4.18E-10	-2.268E1	1E-2
13FPbK14									
1	0.0	5.215E-11	1.918E12	8.023E-13	8.02E-14	1.545E-9	1.55E-10	-2.368E1	∞

¹⁴ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

¹⁵ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond ¹⁶ Pastilla (S/mm)	Cond Pelicula (S/cm)	Cond ¹⁷ Película (S/mm)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK14									
2	5.0	5.928E-11	1.687E12	9.12E-13	9.12E-14	1.756E-9	1.76E-10	-2.355E1	2E-1
3	10.0	7.027E-11	1.423E12	1.081E-12	1.08E-13	2.082E-9	2.08E-10	-2.338E1	1E-1
4	15.0	8.199E-11	1.22E12	1.261E-12	1.26E-13	2.429E-9	2.43E-10	-2.322E1	6.667E-2
5	20.0	9.807E-11	1.02E12	1.509E-12	1.51E-13	2.906E-9	2.91E-10	-2.305E1	5E-2
6	25.0	1.039E-10	9.625E11	1.598E-12	1.60E-13	3.079E-9	3.08E-10	-2.299E1	4E-2
7	30.0	1.219E-10	8.203E11	1.875E-12	1.88E-13	3.612E-9	3.61E-10	-2.283E1	3.333E-2
8	35.0	1.296E-10	7.716E11	1.994E-12	1.99E-13	3.84E-9	3.84E-10	-2.277E1	2.857E-2
9	40.0	1.413E-10	7.077E11	2.174E-12	2.17E-13	4.187E-9	4.19E-10	-2.268E1	2.5E-2
10	45.0	1.58E-10	6.329E11	2.431E-12	2.43E-13	4.681E-9	4.68E-10	-2.257E1	2.222E-2
11	50.0	1.653E-10	6.05E11	2.543E-12	2.54E-13	4.898E-9	4.90E-10	-2.252E1	2E-2
12	55.0	1.851E-10	5.402E11	2.848E-12	2.85E-13	5.484E-9	5.48E-10	-2.241E1	1.818E-2
13	60.0	2.002E-10	4.995E11	3.08E-12	3.08E-13	5.932E-9	5.93E-10	-2.233E1	1.667E-2
14	65.0	2.115E-10	4.728E11	3.254E-12	3.25E-13	6.267E-9	6.27E-10	-2.228E1	1.538E-2
15	70.0	2.234E-10	4.476E11	3.437E-12	3.44E-13	6.619E-9	6.62E-10	-2.222E1	1.429E-2
16	75.0	2.354E-10	4.248E11	3.622E-12	3.62E-13	6.975E-9	6.97E-10	-2.217E1	1.333E-2
17	80.0	2.537E-10	3.942E11	3.903E-12	3.90E-13	7.517E-9	7.52E-10	-2.209E1	1.25E-2
18	85.0	2.708E-10	3.693E11	4.166E-12	4.17E-13	8.024E-9	8.02E-10	-2.203E1	1.176E-2
19	90.0	2.804E-10	3.566E11	4.314E-12	4.31E-13	8.308E-9	8.31E-10	-2.199E1	1.111E-2
20	95.0	2.972E-10	3.365E11	4.572E-12	4.57E-13	8.806E-9	8.81E-10	-2.194E1	1.053E-2
21	100.0	3.098E-10	3.228E11	4.766E-12	4.77E-13	9.179E-9	9.18E-10	-2.19E1	1E-2
13FPbK15									
1	0.0	6.028E-11	1.659E12	9.274E-13	9.27E-14	1.786E-9	1.79E-10	-2.353E1	∞
2	5.0	1.014E-10	9.862E11	1.56E-12	1.56E-13	3.004E-9	3.00E-10	-2.301E1	2E-1
3	10.0	1.455E-10	6.873E11	2.238E-12	2.24E-13	4.311E-9	4.31E-10	-2.265E1	1E-1
4	15.0	1.858E-10	5.382E11	2.858E-12	2.86E-13	5.505E-9	5.51E-10	-2.241E1	6.667E-2
5	20.0	2.562E-10	3.903E11	3.942E-12	3.94E-13	7.591E-9	7.59E-10	-2.209E1	5E-2
6	25.0	2.871E-10	3.483E11	4.417E-12	4.42E-13	8.507E-9	8.51E-10	-2.197E1	4E-2
7	30.0	3.314E-10	3.018E11	5.098E-12	5.10E-13	9.819E-9	9.82E-10	-2.183E1	3.333E-2
8	35.0	3.902E-10	2.563E11	6.003E-12	6.00E-13	1.156E-8	1.16E-09	-2.166E1	2.857E-2
9	40.0	4.409E-10	2.268E11	6.783E-12	6.78E-13	1.306E-8	1.31E-09	-2.154E1	2.5E-2
10	45.0	4.849E-10	2.062E11	7.46E-12	7.46E-13	1.437E-8	1.44E-09	-2.145E1	2.222E-2
11	50.0	5.058E-10	1.977E11	7.782E-12	7.78E-13	1.499E-8	1.50E-09	-2.14E1	2E-2
12	55.0	5.37E-10	1.862E11	8.262E-12	8.26E-13	1.591E-8	1.59E-09	-2.135E1	1.818E-2
13	60.0	6.006E-10	1.665E11	9.24E-12	9.24E-13	1.78E-8	1.78E-09	-2.123E1	1.667E-2
14	65.0	6.813E-10	1.468E11	1.048E-11	1.05E-12	2.019E-8	2.02E-09	-2.111E1	1.538E-2
15	70.0	6.987E-10	1.431E11	1.075E-11	1.07E-12	2.07E-8	2.07E-09	-2.108E1	1.429E-2

¹⁶ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

¹⁷ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond Pastilla (S/mm)	Cond Pelicula (S/cm)	Cond Pelicula (S/mm)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK15									
16	75.0	7.413E-10	1.349E11	1.14E-11	1.14E-12	2.196E-8	2.20E-09	-2.102E1	1.333E-2
17	80.0	8.231E-10	1.215E11	1.266E-11	1.27E-12	2.439E-8	2.44E-09	-2.092E1	1.25E-2
18	85.0	9.261E-10	1.08E11	1.425E-11	1.42E-12	2.744E-8	2.74E-09	-2.08E1	1.176E-2
19	90.0	9.538E-10	1.048E11	1.467E-11	1.47E-12	2.826E-8	2.83E-09	-2.077E1	1.111E-2
20	95.0	9.862E-10	1.014E11	1.517E-11	1.52E-12	2.922E-8	2.92E-09	-2.074E1	1.053E-2
21	100.0	1.091E-9	9.166E10	1.678E-11	1.68E-12	3.233E-8	3.23E-09	-2.064E1	1E-2
13FPbK16									
1	0.0	4.535E-11	2.205E12	6.977E-13	6.98E-14	1.344E-9	1.34E-10	-2.382E1	∞
2	5.0	1.886E-10	5.302E11	2.902E-12	2.90E-13	5.588E-9	5.59E-10	-2.239E1	2E-1
3	10.0	3.271E-10	3.057E11	5.032E-12	5.03E-13	9.692E-9	9.69E-10	-2.184E1	1E-1
4	15.0	4.432E-10	2.256E11	6.818E-12	6.82E-13	1.313E-8	1.31E-09	-2.154E1	6.667E-2
5	20.0	5.568E-10	1.796E11	8.566E-12	8.57E-13	1.65E-8	1.65E-09	-2.131E1	5E-2
6	25.0	7.389E-10	1.353E11	1.137E-11	1.14E-12	2.189E-8	2.19E-09	-2.103E1	4E-2
7	30.0	9.098E-10	1.099E11	1.4E-11	1.40E-12	2.696E-8	2.70E-09	-2.082E1	3.333E-2
8	35.0	1.043E-9	9.588E10	1.605E-11	1.60E-12	3.09E-8	3.09E-09	-2.068E1	2.857E-2
9	40.0	1.25E-9	8E10	1.923E-11	1.92E-12	3.704E-8	3.70E-09	-2.05E1	2.5E-2
10	45.0	1.579E-9	6.333E10	2.429E-11	2.43E-12	4.679E-8	4.68E-09	-2.027E1	2.222E-2
11	50.0	1.765E-9	5.666E10	2.715E-11	2.72E-12	5.23E-8	5.23E-09	-2.016E1	2E-2
12	55.0	1.977E-8	5.058E9	3.042E-10	3.04E-11	5.858E-7	5.86E-08	-1.774E1	1.818E-2
13	60.0	6.278E-8	1.593E9	9.658E-10	9.66E-11	1.86E-6	1.86E-07	-1.658E1	1.667E-2
14	65.0	6.831E-8	1.464E9	1.051E-9	1.05E-10	2.024E-6	2.02E-07	-1.65E1	1.538E-2
15	70.0	7.382E-8	1.355E9	1.136E-9	1.14E-10	2.187E-6	2.19E-07	-1.642E1	1.429E-2
16	75.0	7.919E-8	1.263E9	1.218E-9	1.22E-10	2.346E-6	2.35E-07	-1.635E1	1.333E-2
17	80.0	8.459E-8	1.182E9	1.301E-9	1.30E-10	2.506E-6	2.51E-07	-1.629E1	1.25E-2
18	85.0	9.006E-8	1.11E9	1.386E-9	1.39E-10	2.668E-6	2.67E-07	-1.622E1	1.176E-2
19	90.0	9.562E-8	1.046E9	1.471E-9	1.47E-10	2.833E-6	2.83E-07	-1.616E1	1.111E-2
20	95.0	1.007E-7	9.93E8	1.549E-9	1.55E-10	2.984E-6	2.98E-07	-1.611E1	1.053E-2
21	100.0	1.066E-7	9.381E8	1.64E-9	1.64E-10	3.159E-6	3.16E-07	-1.605E1	1E-2
13FPbK17									
1	0.0	3.685E-11	2.714E12	5.669E-13	5.67E-14	1.092E-9	1.09E-10	-2.402E1	∞
2	5.0	4.123E-10	2.425E11	6.343E-12	6.34E-13	1.222E-8	1.22E-09	-2.161E1	2E-1
3	10.0	7.826E-10	1.278E11	1.204E-11	1.20E-12	2.319E-8	2.32E-09	-2.097E1	1E-1
4	15.0	1.225E-9	8.163E10	1.885E-11	1.88E-12	3.63E-8	3.63E-09	-2.052E1	6.667E-2
5	20.0	1.782E-9	5.612E10	2.742E-11	2.74E-12	5.28E-8	5.28E-09	-2.015E1	5E-2
6	25.0	6.86E-8	1.458E9	1.055E-9	1.06E-10	2.033E-6	2.03E-07	-1.649E1	4E-2
7	30.0	8.316E-8	1.203E9	1.279E-9	1.28E-10	2.464E-6	2.46E-07	-1.63E1	3.333E-2

¹⁸ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

¹⁹ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond ²⁰ Pastilla (S/mm)	Cond Película (S/cm)	Cond ²¹ Película (S/mm)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK17									
8	35.0	9.716E-8	1.029E9	1.495E-9	1.49E-10	2.879E-6	2.88E-07	-1.615E1	2.857E-2
9	40.0	1.111E-7	9.001E8	1.709E-9	1.71E-10	3.292E-6	3.29E-07	-1.601E1	2.5E-2
10	45.0	1.253E-7	7.981E8	1.928E-9	1.93E-10	3.713E-6	3.71E-07	-1.589E1	2.222E-2
11	50.0	1.398E-7	7.153E8	2.151E-9	2.15E-10	4.142E-6	4.14E-07	-1.578E1	2E-2
12	55.0	1.541E-7	6.489E8	2.371E-9	2.37E-10	4.566E-6	4.57E-07	-1.569E1	1.818E-2
13	60.0	1.684E-7	5.938E8	2.591E-9	2.59E-10	4.99E-6	4.99E-07	-1.56E1	1.667E-2
14	65.0	1.83E-7	5.464E8	2.815E-9	2.82E-10	5.422E-6	5.42E-07	-1.551E1	1.538E-2
15	70.0	1.975E-7	5.063E8	3.038E-9	3.04E-10	5.852E-6	5.85E-07	-1.544E1	1.429E-2
16	75.0	2.122E-7	4.713E8	3.265E-9	3.26E-10	6.287E-6	6.29E-07	-1.537E1	1.333E-2
17	80.0	2.267E-7	4.411E8	3.488E-9	3.49E-10	6.717E-6	6.72E-07	-1.53E1	1.25E-2
18	85.0	2.415E-7	4.141E8	3.715E-9	3.72E-10	7.156E-6	7.16E-07	-1.524E1	1.176E-2
19	90.0	2.562E-7	3.903E8	3.942E-9	3.94E-10	7.591E-6	7.59E-07	-1.518E1	1.111E-2
20	95.0	2.709E-7	3.691E8	4.168E-9	4.17E-10	8.027E-6	8.03E-07	-1.512E1	1.053E-2
21	100.0	2.857E-7	3.5E8	4.395E-9	4.40E-10	8.465E-6	8.47E-07	-1.507E1	1E-2
13FPbK18									
1	0.0	5.02E-12	1.992E13	7.723E-14	7.72E-15	1.487E-10	1.49E-11	-2.602E1	∞
2	5.0	7.309E-10	1.368E11	1.124E-11	1.12E-12	2.166E-8	2.17E-09	-2.104E1	2E-1
3	10.0	6.191E-8	1.615E9	9.525E-10	9.52E-11	1.834E-6	1.83E-07	-1.66E1	1E-1
4	15.0	9.443E-8	1.059E9	1.453E-9	1.45E-10	2.798E-6	2.80E-07	-1.618E1	6.667E-2
5	20.0	1.273E-7	7.855E8	1.958E-9	1.96E-10	3.772E-6	3.77E-07	-1.588E1	5E-2
6	25.0	1.606E-7	6.227E8	2.471E-9	2.47E-10	4.759E-6	4.76E-07	-1.564E1	4E-2
7	30.0	1.943E-7	5.147E8	2.989E-9	2.99E-10	5.757E-6	5.76E-07	-1.545E1	3.333E-2
8	35.0	2.284E-7	4.378E8	3.514E-9	3.51E-10	6.767E-6	6.77E-07	-1.529E1	2.857E-2
9	40.0	2.628E-7	3.805E8	4.043E-9	4.04E-10	7.787E-6	7.79E-07	-1.515E1	2.5E-2
10	45.0	2.974E-7	3.362E8	4.575E-9	4.58E-10	8.812E-6	8.81E-07	-1.503E1	2.222E-2
11	50.0	3.326E-7	3.007E8	5.117E-9	5.12E-10	9.855E-6	9.85E-07	-1.492E1	2E-2
12	55.0	3.676E-7	2.72E8	5.655E-9	5.66E-10	1.089E-5	1.09E-06	-1.482E1	1.818E-2
13	60.0	4.031E-7	2.481E8	6.202E-9	6.20E-10	1.194E-5	1.19E-06	-1.472E1	1.667E-2
14	65.0	4.387E-7	2.279E8	6.749E-9	6.75E-10	1.3E-5	1.30E-06	-1.464E1	1.538E-2
15	70.0	4.746E-7	2.107E8	7.302E-9	7.30E-10	1.406E-5	1.41E-06	-1.456E1	1.429E-2
16	75.0	5.109E-7	1.957E8	7.86E-9	7.86E-10	1.514E-5	1.51E-06	-1.449E1	1.333E-2
17	80.0	5.477E-7	1.826E8	8.426E-9	8.43E-10	1.623E-5	1.62E-06	-1.442E1	1.25E-2
18	85.0	5.843E-7	1.711E8	8.989E-9	8.99E-10	1.731E-5	1.73E-06	-1.435E1	1.176E-2
19	90.0	6.211E-7	1.61E8	9.555E-9	9.56E-10	1.84E-5	1.84E-06	-1.429E1	1.111E-2
20	95.0	6.585E-7	1.519E8	1.013E-8	1.01E-09	1.951E-5	1.95E-06	-1.423E1	1.053E-2
21	100.0	6.962E-7	1.436E8	1.071E-8	1.07E-09	2.063E-5	2.06E-06	-1.418E1	1E-2

²⁰ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

²¹ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond ²² Pastilla (S/mm)	Cond Película (S/cm)	Cond ²³ Película (S/mm)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK19									
1	0.0	-1.32E-10	-7.553E11	-2.037E-12	-2.04E-13	-3.923E-9	-3.92E-10	-2.533E1	∞
2	5.0	1.94E-7	5.155E8	2.985E-9	2.98E-10	5.748E-6	5.75E-07	-1.546E1	2E-1
3	10.0	3.927E-7	2.546E8	6.042E-9	6.04E-10	1.164E-5	1.16E-06	-1.475E1	1E-1
4	15.0	5.995E-7	1.668E8	9.223E-9	9.22E-10	1.776E-5	1.78E-06	-1.433E1	6.667E-2
5	20.0	8.102E-7	1.234E8	1.246E-8	1.25E-09	2.401E-5	2.40E-06	-1.403E1	5E-2
6	25.0	1.025E-6	9.756E7	1.577E-8	1.58E-09	3.037E-5	3.04E-06	-1.379E1	4E-2
7	30.0	1.245E-6	8.032E7	1.915E-8	1.92E-09	3.689E-5	3.69E-06	-1.36E1	3.333E-2
8	35.0	1.469E-6	6.807E7	2.26E-8	2.26E-09	4.353E-5	4.35E-06	-1.343E1	2.857E-2
9	40.0	1.7E-6	5.882E7	2.615E-8	2.62E-09	5.037E-5	5.04E-06	-1.328E1	2.5E-2
10	45.0	1.936E-6	5.165E7	2.978E-8	2.98E-09	5.736E-5	5.74E-06	-1.315E1	2.222E-2
11	50.0	2.178E-6	4.591E7	3.351E-8	3.35E-09	6.453E-5	6.45E-06	-1.304E1	2E-2
12	55.0	2.427E-6	4.12E7	3.734E-8	3.73E-09	7.191E-5	7.19E-06	-1.293E1	1.818E-2
13	60.0	2.68E-6	3.731E7	4.123E-8	4.12E-09	7.941E-5	7.94E-06	-1.283E1	1.667E-2
14	65.0	2.944E-6	3.397E7	4.529E-8	4.53E-09	8.723E-5	8.72E-06	-1.274E1	1.538E-2
15	70.0	3.218E-6	3.108E7	4.951E-8	4.95E-09	9.535E-5	9.53E-06	-1.265E1	1.429E-2
16	75.0	3.512E-6	2.847E7	5.403E-8	5.40E-09	1.041E-4	1.04E-05	-1.256E1	1.333E-2
17	80.0	3.833E-6	2.609E7	5.897E-8	5.90E-09	1.136E-4	1.14E-05	-1.247E1	1.25E-2
18	85.0	4.192E-6	2.385E7	6.449E-8	6.45E-09	1.242E-4	1.24E-05	-1.238E1	1.176E-2
19	90.0	4.584E-6	2.182E7	7.052E-8	7.05E-09	1.358E-4	1.36E-05	-1.229E1	1.111E-2
20	95.0	5.018E-6	1.993E7	7.72E-8	7.72E-09	1.487E-4	1.49E-05	-1.22E1	1.053E-2
21	100.0	5.495E-6	1.82E7	8.454E-8	8.45E-09	1.628E-4	1.63E-05	-1.211E1	1E-2
13FPbK110									
1	0.0	-4.099E-8	-2.44E9	-6.306E-10	-6.31E-11	-1.215E-6	-1.21E-07	-2.533E1	∞
2	5.0	2.607E-7	3.836E8	4.011E-9	4.01E-10	7.724E-6	7.72E-07	-1.516E1	2E-1
3	10.0	5.776E-7	1.731E8	8.886E-9	8.89E-10	1.711E-5	1.71E-06	-1.436E1	1E-1
4	15.0	9.084E-7	1.101E8	1.398E-8	1.40E-09	2.692E-5	2.69E-06	-1.391E1	6.667E-2
5	20.0	1.256E-6	7.962E7	1.932E-8	1.93E-09	3.721E-5	3.72E-06	-1.359E1	5E-2
6	25.0	1.624E-6	6.158E7	2.498E-8	2.50E-09	4.812E-5	4.81E-06	-1.333E1	4E-2
7	30.0	2.023E-6	4.943E7	3.112E-8	3.11E-09	5.994E-5	5.99E-06	-1.311E1	3.333E-2
8	35.0	2.446E-6	4.088E7	3.763E-8	3.76E-09	7.247E-5	7.25E-06	-1.292E1	2.857E-2
9	40.0	2.908E-6	3.439E7	4.474E-8	4.47E-09	8.616E-5	8.62E-06	-1.275E1	2.5E-2
10	45.0	3.411E-6	2.932E7	5.248E-8	5.25E-09	1.011E-4	1.01E-05	-1.259E1	2.222E-2
11	50.0	3.951E-6	2.531E7	6.078E-8	6.08E-09	1.171E-4	1.17E-05	-1.244E1	2E-2
12	55.0	4.535E-6	2.205E7	6.977E-8	6.98E-09	1.344E-4	1.34E-05	-1.23E1	1.818E-2
13	60.0	5.151E-6	1.941E7	7.925E-8	7.92E-09	1.526E-4	1.53E-05	-1.218E1	1.667E-2
14	65.0	5.821E-6	1.718E7	8.955E-8	8.96E-09	1.725E-4	1.72E-05	-1.205E1	1.538E-2

²² Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

²³ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond ²⁴ Pastilla (S/m)	Cond Película (S/cm)	Cond ²⁵ Película (S/m)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK110									
15	70.0	6.546E-6	1.528E7	1.007E-7	1.01E-08	1.94E-4	1.94E-05	-1.194E1	1.429E-2
16	75.0	7.368E-6	1.357E7	1.134E-7	1.13E-08	2.183E-4	2.18E-05	-1.182E1	1.333E-2
17	80.0	8.292E-6	1.206E7	1.276E-7	1.28E-08	2.457E-4	2.46E-05	-1.17E1	1.25E-2
18	85.0	9.374E-6	1.067E7	1.442E-7	1.44E-08	2.777E-4	2.78E-05	-1.158E1	1.176E-2
19	90.0	1.063E-5	9.407E6	1.635E-7	1.64E-08	3.15E-4	3.15E-05	-1.145E1	1.111E-2
20	95.0	1.211E-5	8.258E6	1.863E-7	1.86E-08	3.588E-4	3.59E-05	-1.132E1	1.053E-2
21	100.0	1.415E-5	7.067E6	2.177E-7	2.18E-08	4.193E-4	4.19E-05	-1.117E1	1E-2
13FPbK111									
1	0.0	-2.362E-8	-4.234E9	-3.634E-10	-3.63E-11	-6.999E-7	-7.00E-08	-2.533E1	∞
2	5.0	3.694E-7	2.707E8	5.683E-9	5.68E-10	1.095E-5	1.09E-06	-1.481E1	2E-1
3	10.0	7.878E-7	1.269E8	1.212E-8	1.21E-09	2.334E-5	2.33E-06	-1.405E1	1E-1
4	15.0	1.222E-6	8.183E7	1.88E-8	1.88E-09	3.621E-5	3.62E-06	-1.362E1	6.667E-2
5	20.0	1.676E-6	5.967E7	2.578E-8	2.58E-09	4.966E-5	4.97E-06	-1.33E1	5E-2
6	25.0	2.158E-6	4.634E7	3.32E-8	3.32E-09	6.394E-5	6.39E-06	-1.305E1	4E-2
7	30.0	2.676E-6	3.737E7	4.117E-8	4.12E-09	7.929E-5	7.93E-06	-1.283E1	3.333E-2
8	35.0	3.246E-6	3.081E7	4.994E-8	4.99E-09	9.618E-5	9.62E-06	-1.264E1	2.857E-2
9	40.0	3.893E-6	2.569E7	5.989E-8	5.99E-09	1.153E-4	1.15E-05	-1.246E1	2.5E-2
10	45.0	4.656E-6	2.148E7	7.163E-8	7.16E-09	1.38E-4	1.38E-05	-1.228E1	2.222E-2
11	50.0	5.561E-6	1.798E7	8.555E-8	8.56E-09	1.648E-4	1.65E-05	-1.21E1	2E-2
12	55.0	6.589E-6	1.518E7	1.014E-7	1.01E-08	1.952E-4	1.95E-05	-1.193E1	1.818E-2
13	60.0	7.689E-6	1.301E7	1.183E-7	1.18E-08	2.278E-4	2.28E-05	-1.178E1	1.667E-2
14	65.0	8.89E-6	1.125E7	1.368E-7	1.37E-08	2.634E-4	2.63E-05	-1.163E1	1.538E-2
15	70.0	1.019E-5	9.814E6	1.568E-7	1.57E-08	3.019E-4	3.02E-05	-1.149E1	1.429E-2
16	75.0	1.164E-5	8.591E6	1.791E-7	1.79E-08	3.449E-4	3.45E-05	-1.136E1	1.333E-2
17	80.0	1.328E-5	7.53E6	2.043E-7	2.04E-08	3.935E-4	3.93E-05	-1.123E1	1.25E-2
18	85.0	1.519E-5	6.583E6	2.337E-7	2.34E-08	4.501E-4	4.50E-05	-1.109E1	1.176E-2
19	90.0	1.746E-5	5.727E6	2.686E-7	2.69E-08	5.173E-4	5.17E-05	-1.096E1	1.111E-2
20	95.0	2.058E-5	4.859E6	3.166E-7	3.17E-08	6.098E-4	6.10E-05	-1.079E1	1.053E-2
21	100.0	2.398E-5	4.17E6	3.689E-7	3.69E-08	7.105E-4	7.11E-05	-1.064E1	1E-2
13FPbK112									
1	0.00E+00	-5.02E-08	-1.99E+09	-7.73E-10	-7.73E-11	-1.489E-6	-1.4E-07	-2.402E1	∞
2	5.00E+00	7.14E-07	1.40E+08	1.10E-08	1.10E-09	2.115E-5	2.11E-06	-2.161E1	2E-1
3	1.00E+01	1.56E-06	6.42E+07	2.40E-08	2.40E-09	4.613E-5	4.61E-06	-2.097E1	1E-1
4	1.50E+01	2.46E-06	4.07E+07	3.78E-08	3.78E-09	7.283E-5	7.28E-06	-2.052E1	6.667E-2
5	2.00E+01	3.44E-06	2.91E+07	5.29E-08	5.29E-09	1.019E-4	1.02E-05	-2.015E1	5E-2
6	2.50E+01	4.55E-06	2.20E+07	7.00E-08	7.00E-09	1.348E-4	1.35E-05	-1.649E1	4E-2

²⁴ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

²⁵ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond ²⁶ Pastilla (S/m)	Cond Película (S/cm)	Cond ²⁷ Película (S/m)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK112									
7	3.00E+01	5.90E-06	1.69E+07	9.08E-08	9.08E-09	1.749E-4	1.75E-05	-1.63E1	3.333E-2
8	3.50E+01	7.87E-06	1.27E+07	1.21E-07	1.21E-08	2.332E-4	2.33E-05	-1.615E1	2.857E-2
9	4.00E+01	1.06E-05	9.42E+06	1.63E-07	1.63E-08	3.147E-4	3.15E-05	-1.601E1	2.5E-2
10	4.50E+01	1.38E-05	7.25E+06	2.12E-07	2.12E-08	4.086E-4	4.09E-05	-1.589E1	2.222E-2
11	5.00E+01	1.73E-05	5.77E+06	2.67E-07	2.67E-08	5.135E-4	5.13E-05	-1.578E1	2E-2
12	5.50E+01	2.16E-05	4.63E+06	3.33E-07	3.33E-08	6.406E-4	6.41E-05	-1.569E1	1.818E-2
13	6.00E+01	2.59E-05	3.86E+06	3.98E-07	3.98E-08	7.671E-4	7.67E-05	-1.56E1	1.667E-2
14	6.50E+01	3.08E-05	3.25E+06	4.74E-07	4.74E-08	9.12E-4	9.12E-05	-1.551E1	1.538E-2
15	7.00E+01	3.65E-05	2.74E+06	5.62E-07	5.62E-08	1.082E-3	1.08E-04	-1.544E1	1.429E-2
16	7.50E+01	4.35E-05	2.30E+06	6.68E-07	6.68E-08	1.287E-3	1.29E-04	-1.537E1	1.333E-2
17	8.00E+01	5.19E-05	1.93E+06	7.98E-07	7.98E-08	1.537E-3	1.54E-04	-1.53E1	1.25E-2
18	8.50E+01	6.14E-05	1.63E+06	9.44E-07	9.44E-08	1.819E-3	1.82E-04	-1.524E1	1.176E-2
19	9.00E+01	7.18E-05	1.39E+06	1.10E-06	1.10E-07	2.127E-3	2.13E-04	-1.518E1	1.111E-2
20	9.50E+01	8.27E-05	1.21E+06	1.27E-06	1.27E-07	2.452E-3	2.45E-04	-1.512E1	1.053E-2
21	1.00E+02	9.45E-05	1.06E+06	1.45E-06	1.45E-07	2.799E-3	2.80E-04	-1.507E1	1E-2
13FPbK113									
1	0.0	-6.286E-8	-1.591E9	-9.671E-10	-9.67E-11	-1.863E-6	-1.86E-7	-2.533E1	∞
2	5.0	1.472E-6	6.793E7	2.265E-8	2.26E-09	4.361E-5	4.36E-06	-1.343E1	2E-1
3	10.0	3.204E-6	3.121E7	4.929E-8	4.93E-09	9.493E-5	9.49E-06	-1.265E1	1E-1
4	15.0	5.093E-6	1.963E7	7.835E-8	7.84E-09	1.509E-4	1.51E-05	-1.219E1	6.667E-2
5	20.0	7.187E-6	1.391E7	1.106E-7	1.11E-08	2.129E-4	2.13E-05	-1.184E1	5E-2
6	25.0	9.798E-6	1.021E7	1.507E-7	1.51E-08	2.903E-4	2.90E-05	-1.153E1	4E-2
7	30.0	1.504E-5	6.649E6	2.314E-7	2.31E-08	4.456E-4	4.46E-05	-1.11E1	3.333E-2
8	35.0	2.679E-5	3.733E6	4.122E-7	4.12E-08	7.938E-4	7.94E-05	-1.053E1	2.857E-2
9	40.0	3.968E-5	2.52E6	6.105E-7	6.10E-08	1.176E-3	1.18E-04	-1.013E1	2.5E-2
10	45.0	5.296E-5	1.888E6	8.148E-7	8.15E-08	1.569E-3	1.57E-04	-9.846E0	2.222E-2
11	50.0	6.621E-5	1.51E6	1.019E-6	1.02E-07	1.962E-3	1.96E-04	-9.623E0	2E-2
12	55.0	7.974E-5	1.254E6	1.227E-6	1.23E-07	2.363E-3	2.36E-04	-9.437E0	1.818E-2
13	60.0	9.484E-5	1.054E6	1.459E-6	1.46E-07	2.81E-3	2.81E-04	-9.263E0	1.667E-2
14	65.0	1.12E-4	8.929E5	1.723E-6	1.72E-07	3.319E-3	3.32E-04	-9.097E0	1.538E-2
15	70.0	1.315E-4	7.605E5	2.023E-6	2.02E-07	3.896E-3	3.90E-04	-8.937E0	1.429E-2
16	75.0	1.499E-4	6.671E5	2.306E-6	2.31E-07	4.441E-3	4.44E-04	-8.806E0	1.333E-2
17	80.0	1.634E-4	6.12E5	2.514E-6	2.51E-07	4.841E-3	4.84E-04	-8.719E0	1.25E-2
18	85.0	1.72E-4	5.814E5	2.646E-6	2.65E-07	5.096E-3	5.10E-04	-8.668E0	1.176E-2
19	90.0	1.787E-4	5.596E5	2.749E-6	2.75E-07	5.295E-3	5.29E-04	-8.63E0	1.111E-2
20	95.0	1.844E-4	5.423E5	2.837E-6	2.84E-07	5.464E-3	5.46E-04	-8.598E0	1.053E-2

²⁶ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

²⁷ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

	Temp (°C)	Corriente (A)	Resistencia (Ω)	Cond Pastilla (S/cm)	Cond ²⁸ Pastilla (S/m)	Cond Película (S/cm)	Cond ²⁹ Película (S/m)	Ln(A)	(1/°C)
13FPbK113									
21	100.0	1.894E-4	5.28E5	2.914E-6	2.91E-07	5.612E-3	5.61E-04	-8.572E0	1E-2
13FPbK114									
1	0.0	-1.659E-7	-6.028E8	-2.552E-9	-2.55E-10	-4.916E-6	-4.92E-7	-2.533E1	∞
2	5.0	2.727E-6	3.667E7	4.195E-8	4.20E-09	8.08E-5	8.08E-06	-1.281E1	2E-1
3	10.0	6.128E-6	1.632E7	9.428E-8	9.43E-09	1.816E-4	1.82E-05	-1.2E1	1E-1
4	15.0	9.653E-6	1.036E7	1.485E-7	1.49E-08	2.86E-4	2.86E-05	-1.155E1	6.667E-2
5	20.0	1.356E-5	7.375E6	2.086E-7	2.09E-08	4.018E-4	4.02E-05	-1.121E1	5E-2
6	25.0	1.849E-5	5.408E6	2.845E-7	2.84E-08	5.479E-4	5.48E-05	-1.09E1	4E-2
7	30.0	3.01E-5	3.322E6	4.631E-7	4.63E-08	8.919E-4	8.92E-05	-1.041E1	3.333E-2
8	35.0	4.939E-5	2.025E6	7.598E-7	7.60E-08	1.463E-3	1.46E-04	-9.916E0	2.857E-2
9	40.0	7.192E-5	1.39E6	1.106E-6	1.11E-07	2.131E-3	2.13E-04	-9.54E0	2.5E-2
10	45.0	9.813E-5	1.019E6	1.51E-6	1.51E-07	2.908E-3	2.91E-04	-9.229E0	2.222E-2
11	50.0	1.274E-4	7.849E5	1.96E-6	1.96E-07	3.775E-3	3.77E-04	-8.968E0	2E-2
12	55.0	1.591E-4	6.285E5	2.448E-6	2.45E-07	4.714E-3	4.71E-04	-8.746E0	1.818E-2
13	60.0	1.878E-4	5.325E5	2.889E-6	2.89E-07	5.564E-3	5.56E-04	-8.58E0	1.667E-2
14	65.0	2.08E-4	4.808E5	3.2E-6	3.20E-07	6.163E-3	6.16E-04	-8.478E0	1.538E-2
15	70.0	2.182E-4	4.583E5	3.357E-6	3.36E-07	6.465E-3	6.47E-04	-8.43E0	1.429E-2
16	75.0	2.275E-4	4.396E5	3.5E-6	3.50E-07	6.741E-3	6.74E-04	-8.388E0	1.333E-2
17	80.0	2.361E-4	4.235E5	3.632E-6	3.63E-07	6.996E-3	7.00E-04	-8.351E0	1.25E-2
18	85.0	2.447E-4	4.087E5	3.765E-6	3.76E-07	7.25E-3	7.25E-04	-8.315E0	1.176E-2
19	90.0	2.508E-4	3.987E5	3.858E-6	3.86E-07	7.431E-3	7.43E-04	-8.291E0	1.111E-2
20	95.0	2.531E-4	3.951E5	3.894E-6	3.89E-07	7.499E-3	7.50E-04	-8.282E0	1.053E-2
21	100.0	2.483E-4	4.027E5	3.82E-6	3.82E-07	7.357E-3	7.36E-04	-8.301E0	1E-2

²⁸ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

²⁹ Conductividad utilizada para los cálculos de MS EXCEL®

ANEXO 2. Tabla de comparación de coeficiente de absorción del material 18FtCo1 antes de la corrección


Primeros 30 datos	T _{SPEOMM}	α _{SPEOMM}	T _{MS} EXCEL®	α _{MS EXCEL®}	Últimos 30 datos	T _{SPEOMM}	α _{SPEOMM}	T _{MS} EXCEL®	α _{MS EXCEL®}
1	0.0	-2915828.2767241225	0	#NUM!	396	78.16	-214722.33277940884	77.803	-29027.86661
2	0.0	-2902160.855494752	0.004	36809.73945	397	77.98	-63540.119869549955	78.163	-29058.6426
3	0.02	-2908307.652786028	0.02	26080.15337	398	78.04	-1.0E-40	77.989	-29043.78527
4	0.0	-2910089.8446691087	0.005	35322.11578	399	77.93	-1.0E-40	78.049	-29048.91223
5	0.0	-2908732.416525575	0	#NUM!	400	78.4	-1.0E-40	77.934	-29039.0821
6	0.02	-2913555.6907218904	0.029	23603.06299	401	78.33	-1.0E-40	78.4	-29078.82618
7	0.0	-2910428.7702822383	0	#NUM!	402	77.9	-1.0E-40	78.332	-29073.04136
8	0.01	-2917674.302657181	0.012	29485.65753	403	78.13	-1.0E-40	77.908	-29036.85762
9	0.0	-2908562.5435047387	0	#NUM!	404	78.45	-1.0E-40	78.131	-29055.9127
10	0.0	-2906350.2462182455	0.006	34106.63873	405	78.1	-1.0E-40	78.452	-29083.24649
11	0.0	-2903702.876228511	0	#NUM!	406	78.27	-1.0E-40	78.1	-29053.26705
12	0.0	-2909326.631458487	0	#NUM!	407	78.58	-1.0E-40	78.278	-29068.44395
13	0.0	-2906861.428351917	0	#NUM!	408	78.44	-1.0E-40	78.581	-29094.1996
14	0.0	-2913049.617823095	0	#NUM!	409	79.16	-1.0E-40	78.443	-29082.48164
15	0.03	-2915408.0115228714	0.032	22946.79584	410	78.17	-1.0E-40	79.16	-29143.1408
16	0.05	-2907201.9988148366	0.058	18982.08179	411	78.32	-1.0E-40	78.175	-29059.66602
17	0.0	-2905923.961488159	0.002	41430.72066	412	79.29	-1.0E-40	78.32	-29072.01999
18	0.06	-2914314.080489577	0.068	17921.65049	413	79.01	-1.0E-40	79.29	-29154.08012
19	0.02	-2908222.667552097	0.028	23837.00513	414	78.28	-1.0E-40	79.012	-29130.66493
20	0.05	-2909411.476086876	0.059	18868.1189	415	78.57	-1.0E-40	78.283	-29068.86977
21	0.0	-2906776.2585444977	0	#NUM!	416	77.91	-1.0E-40	78.57	-29093.26631
22	0.02	-2905326.70456376	0.024	24864.67632	417	78.22	-1.0E-40	77.917	-29037.62772
23	0.0	-2908307.652786028	0	#NUM!	418	78.48	-1.0E-40	78.225	-29063.9286
24	0.06	-2905582.7373391017	0.066	18120.67025	419	79.56	-1.0E-40	78.481	-29085.71038
25	0.11	-2903617.3019178016	0.111	14654.83385	420	78.7	-1.0E-40	79.564	-29177.07819
26	0.27	-2907287.114252765	0.275	8606.561209	421	79.07	-1.0E-40	78.708	-29104.96535
27	0.44	-2907882.618237575	0.444	5412.871444	422	78.5	-1.0E-40	79.077	-29136.14708
28	0.45	-2903873.9919036464	0.452	5293.820661	423	78.66	-1.0E-40	78.502	-29087.49401
29	0.71	-2904814.343836607	0.719	2199.292808	424	78.45	-1.0E-40	78.661	-29100.9832
30	1.1	-2904301.589036301	1.103	-653.5582685	425	77.73	-1.0E-40	78.459	-29083.8413

ANEXO 3. Imágenes del Tutorial de SPEOMM

Tutorial Eléctrica

Aquí se analizan las propiedades Eléctricas

- 1) Descargar el o los archivos obtenidos mediante análisis eléctrico. Para ello oprimir el botón que dice **[Archivo]**, buscar en el directorio el archivo deseado, y pulsar el botón de **[Abrir]**, si quieres colocar más archivos en la misma gráfica deberás poner la tecla control + el nombre del archivo (extensiones .txt)
- 2) Especifica el voltaje en **[Voltaje]** de análisis
- 3) Selecciona el tipo de material, **[Pastilla o película delgada]**
- 4) Ahora inserta los datos que se piden sobre el material en la sección de **[Datos]**, ahí puedes seleccionar archivos independientemente o todos a la vez.
- 5) Oprime el botón **[I/T]** que graficará la corriente contra la temperatura



Cerrar **Siguiete**

Primer ventana del Tutorial de Eléctrica, pasos 1 a 5

Tutorial Eléctrica

- 6) Oprime el botón **[C/T]** que graficará la conductividad contra la temperatura
- 7) Oprime el botón **[Ln (I)/(1/T)]** que graficará el logaritmo natural de la corriente contra el inverso de la temperatura
- 8) Agregar los datos solicitados en el botón de **[Energía de Activación]**, especificando los valores en el eje "x" o en el eje "y" correspondientes al lugar deseado para calcular la pendiente de la curva, estos datos se obtienen a partir de la última gráfica obtenida. Al ingresar los valores numéricos, para expresar un valor multiplicado por algún valor de diez elevado algún exponente (ej. 5.64×10^{-8}), es necesario escribirlo con el indicador de exponente, E, como se muestra a continuación: 5.64E-8
- 9) Pulsar el botón de **[Resultados]**. Los valores calculados aparecerán en una nueva ventana

Energía de Activación

i Elegir en que eje se elegirán los valores:

Valores en x

Valores en y

Primer valor:

Segundo valor:

8

Segunda ventana del Tutorial de Eléctrica, pasos 6 a 9

Tutorial Óptica

Aquí se analizan las propiedades Ópticas

- 1) Descargar el archivo obtenido mediante el análisis de Espectroscopia UV-VIS.
Para ello oprimir el botón que dice **[Archivo]**, buscar en el directorio el archivo deseado (extensión .txt), y pulsar el botón de **[Abrir]**.
2. Especificar el grosor del material al que se le realizó el análisis especificando el prefijo correspondiente a las unidades.
3. Oprimir el botón para obtener la grafica de la transmitancia contra la longitud de onda **[T/λ]**.

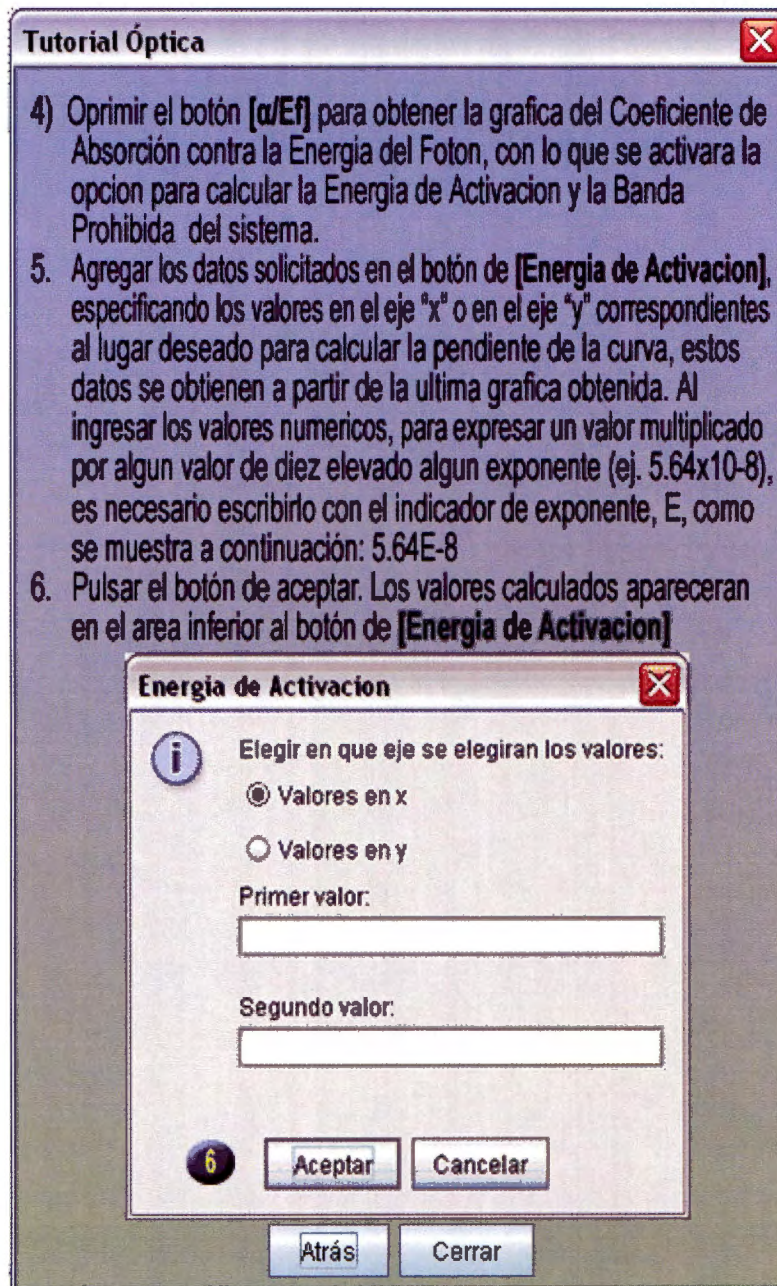
Utilizar c-centi,m-mili,u-micro,n-nano,p-pico.

Energia de Activacion: 0

Banda Prohibida: 0

Cerrar Siguiente

Primer ventana del Tutorial de Óptica, pasos 1 a 3



Segunda ventana del Tutorial de Óptica, pasos 4 a 6

Tutorial IR (comparación de materias primas)

Aquí se determina que tanto se parecen las materias primas a su producto.

- 1) Selecciona **[Materias primas vs productos]** en el escritorio IR.
- 2) En la sección de **[Archivos]** extensión .cvs carga el producto y sus materias primas.
- 3) Selecciona las materias primas a analizar en la parte de **[No de reactivos]**.
- 4) Presiona el botón **[Calcular]** y observarás los resultados obtenidos.

The screenshot shows the SPEOMM software interface. At the top, there is a menu bar with 'Archivo', 'Edición', and 'Ayuda'. Below the menu bar are three tabs: 'Electrica', 'Optica', and 'Infrarrojo'. The main workspace is divided into four columns: 'Tipo de comparación', 'No. de reactivos', 'Archivos', and 'Resultados'. In the 'Tipo de comparación' column, there are three radio buttons: 'Materias primas vs. productos' (selected), 'Dos productos (Degradación)', and 'Buscar una longitud de onda'. In the 'No. de reactivos' column, there are five 'Seleccionar' buttons. In the 'Archivos' column, there are five buttons: 'Producto', 'Mat. Prima 1', 'Mat. Prima 2', 'Mat. Prima 3', 'Mat. Prima 4', and 'Mat. Prima 5'. At the bottom of the interface, there is a 'Longitud de onda a buscar' section with a text input field and a 'Tolerancia' section with several radio buttons. A 'Calcular' button is located at the bottom center, and a 'Cerrar' button is located at the bottom right.

Tutorial de Materias primas vs. Productos

Tutorial IR (análisis de degradación)

Esta opción permite ver si un producto cambió sus características al someterse al proceso relacionado

- 1) Selecciona **[Dos productos (Degradación)]** en el escritorio IR.
- 2) En la sección de **[Archivos]** extensión .cvs carga los elementos a comparar.
- 3) Presiona el botón **[Calcular]** y observarás los resultados obtenidos

Archivo Edición Ayuda

Electrica Optica Infrarrojo

Escritorio IR Tablas

Tipo de comparación

- Materias primas vs. productos
- Dos productos (Degradación) 1
- Buscar una longitud de onda

No. de reactivos

- Seleccionar
- Seleccionar
- Seleccionar
- Seleccionar
- Seleccionar

Archivos

- Producto 1 2
- Producto 2
- Mat. Prima 2
- Mat. Prima 3
- Mat. Prima 4
- Mat. Prima 5

Resultados

Longitud de onda a buscar

Longitud de onda: Tolerancia: 0 +3 +5

Calcular 3

Cerrar

Simulador de Propiedades Electricas y Opticas de M...

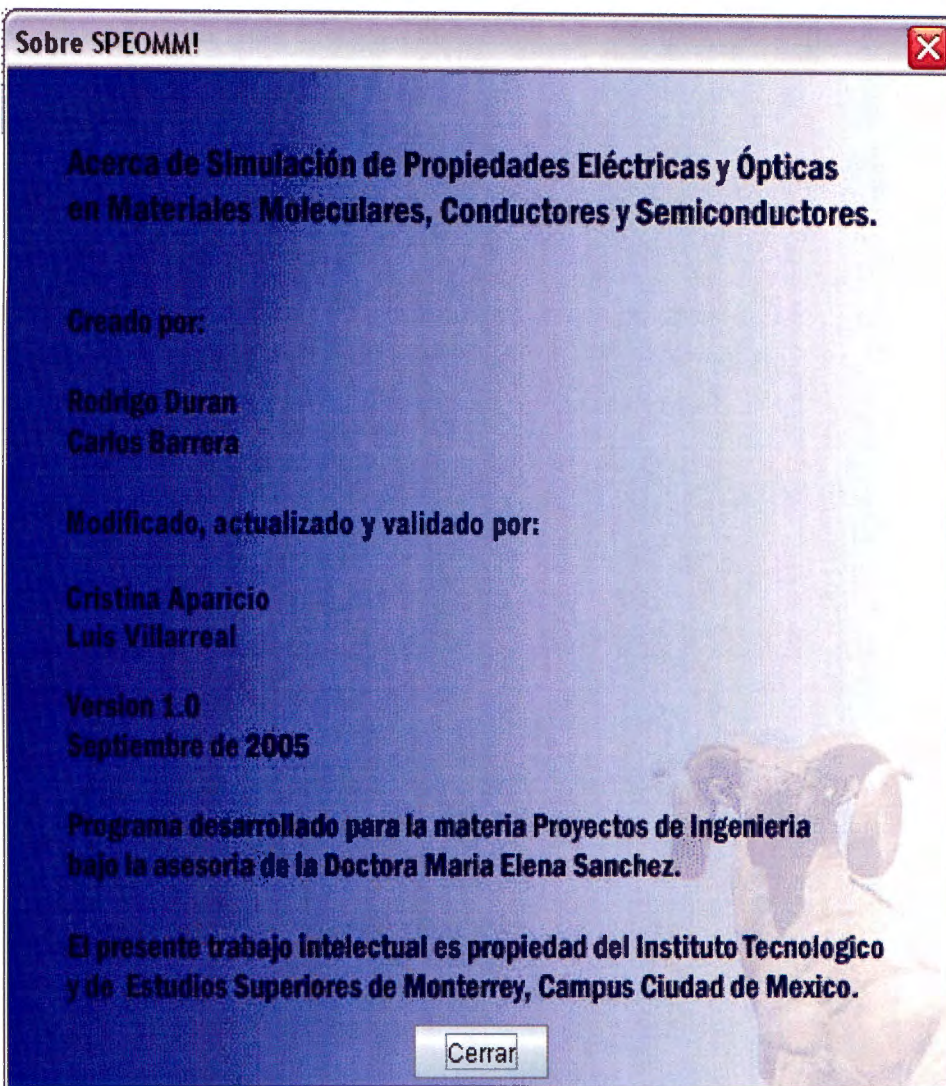
Tutorial de Dos productos (Degradación)

Tutorial IR (longitud de onda)

Se puede buscar la longitud de onda con tolerancias para un estudio IR

- 1) Selecciona **[Buscar una longitud de onda]** en el escritorio IR
- 2) En la sección de **[Archivos]** carga el producto a analizar extensión .cvs
- 3) Selecciona aquellos de los que quieras obtener el resultado en **[No de reactivos]**
- 4) En la sección inferior en **[Longitud de onda]** indica cual es el número a buscar y la tolerancia de búsqueda
- 5) Presiona el botón **[Calcular]** y observarás los resultados obtenidos

Tutorial de Buscar una longitud de onda



Créditos de SPEOMM