



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA
DE CHIMBORAZO**

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE BIOFISICA

“CARACTERIZACIÓN DE GRUPOS
FUNCIONALES DE SUSPENSIONES DE
GRAFENO MULTICAPA EN ETANOL Y
DIMETILFORMAMIDA (DMF), USANDO
ESPECTROSCOPIA INFRARROJA.”

Trabajo de titulación

Tipo: Trabajo experimental

Presentado para optar al grado académico de:

BIOFÍSICO

AUTOR: JOEL OMAR ALVAREZ VEINTIMILLA

DIRECTOR: MSc. MARÍA FERNANDA HEREDIA MOYANO

Riobamba – Ecuador

2020

©2021, Joel Omar Alvarez Veintimilla

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.

Yo, Joel Omar Alvarez Veintimilla, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados

Como autor asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación. El patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 10 de marzo del 2021

Joel Omar Alvarez Veintimilla

C.I: 050359601-7

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA DE BIOFÍSICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo experimental: **“CARACTERIZACIÓN DE GRUPOS FUNCIONALES DE SUSPENSIONES DE GRAFENO MULTICAPA EN ETANOL Y DIMETILFORMAMIDA (DMF), USANDO ESPECTROSCOPIA INFRARROJA.”**, realizado por el señor Joel Omar Alvarez Veintimilla, ha sido minuciosamente revisado por los miembros de Tribunal del Trabajo de Titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

Firma

Fecha

Biof. Miguel Ángel Sáez Paguay

MIGUEL
ANGEL SAEZ
PAGUAY

Firmado digitalmente por MIGUEL
ANGEL SAEZ PAGUAY
Nombre de reconocimiento (DN):
c=EC, o=SECURITY DATA S.A.,
ou=ENTIDAD DE CERTIFICACION DE
INFORMACION,
serialNumber=030720160103,
cn=MIGUEL ANGEL SAEZ PAGUAY
Fecha: 2021.04.05 11:07:58 -05'00'

10/03/2021

PRESIDENTE DEL TRIBUNAL

MSc. María Fernanda Heredia Moyano

Firmado electrónicamente por:
**MARIA FERNANDA
HEREDIA MOYANO**

10/03/2021

DIRECTOR DEL TRABAJO

DE TITULACIÓN

Dr. Richard Willians Pachacama Choca

RICHARD WILLIANS
PACHACAMA
CHOCA

c=EC, serialNumber=0601921703,
ou=PACHACAMA CHOCA, cn=RICHARD
WILLIANS PACHACAMA CHOCA,
1.3.6.1.4.1.37462.10.4=0601921703,
givenName=RICHARD WILLIANS,
email=ripachacama@gmail.com, st=ROBAMBA,
1=CHIMBORAZO, ou=Certificado de Clase 2 de
Persona Física EC (PFIRMA)

10/03/2021

MIEMBRO DEL TRIBUNAL

DEDICATORIA

A las personas que siempre me han apoyado e impulsado a seguir adelante, mis padres, Magaly y Joselito, quienes siempre han sido mi motor y base para lograr mis metas, por su apoyo, amor, trabajo y sacrificio en todos estos años ya que gracias a ustedes he logrado llegar a estas instancias.

A mis hermanos Jimsop y Jhordan los cuales siempre me han brindado fuerzas y su apoyo incondicional en todo momento para cumplir mis sueños.

Joel

AGRADECIMIENTO

A mis padres Magaly y Joselito, por el apoyo incondicional ya que sin ellos esto no hubiera sido posible.

De manera especial a mi tutora MSc. Fernanda Heredia por haberme guiado con paciencia, estar pendiente y nunca haberme dejado solo en este trabajo de titulación, gracias por haberme brindado el apoyo para desarrollarme profesionalmente y seguir luchando por mis sueños.

A la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, en especial a los docentes de la Escuela de Física y Matemática, por la comprensión brindada y por los conocimientos impartidos los cuales serán una fuente del saber.

Joel

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS	ix
ÍNDICE DE FIGURAS	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS	xi
RESUMEN.....	xii
ABSTRACT	xiii
INTRODUCCIÓN	1
Antecedentes	1
Planteamiento del problema	2
Enunciado del problema.....	2
Formulación	3
Justificación.....	3
OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN.....	3
Objetivo general.....	3
Objetivos específicos.....	3
CAPITULO I	
1 MARCO TEÓRICO	4
1.1 Grafeno.....	4
1.1.1 Estructura del grafeno	5
1.1.2 Propiedades del grafeno.....	6
1.1.3 Aplicaciones del grafeno.....	9
1.2 Espectroscopía Infrarroja IR	10
1.2.1 Modos vibracionales	11
1.2.2 Principio físico.....	12
1.3 Bases conceptuales.....	13
1.3.1 Dimetilformamida (DMF)	13

CAPITULO II

2	MARCO METODOLÓGICO.....	14
2.1	Tipo de la investigación.....	14
2.2	Diseño de la investigación.....	14
2.2.1	Diseño experimental.....	14

CAPITULO III

3	MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS.....	19
3.1	DIMETILFORMAMIDA (DMF).....	19
3.2	ETANOL.....	23
4	CONCLUSIONES.....	27
5	RECOMENDACIONES.....	28

BIBLIOGRAFIA

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2: Matriz de consistencia.....	15
Tabla 2-2: Operacionalización de las variables.....	16
Tabla 3-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-DMF (2h).....	20
Tabla 4-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-DMF (5h).....	21
Tabla 5-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-DMF (7h).....	22
Tabla 6-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-Etanol (2h).....	24
Tabla 7-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-Etanol (5h).....	25
Tabla 8-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-Etanol (7h).....	26

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-1: Estructura gráfica del grafeno.....	4
Figura 2-1: Formas alotrópicas del carbono. Grafito (3D); grafeno (2D); nanotubos (1D); fullerenos (0D).....	5
Figura 3-1: Zonas de amplitud del IR.....	10
Figura 4-1: Espectro IR	11
Figura 5-1: Tipo de vibraciones moleculares.	12

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-3: Espectro infrarrojo Grafeno-DMF (2h).....	20
Gráfico 2-3: Espectro infrarrojo Grafeno-DMF (5h).....	21
Gráfico 3-3: Espectro infrarrojo Grafeno-DMF (7h).....	22
Gráfico 4-3: Espectro infrarrojo Grafeno-Etanol (2h).....	24
Gráfico 5-3: Espectro infrarrojo Grafeno-Etanol (5h).....	25
Gráfico 6-3: Espectro infrarrojo Grafeno-Etanol (7h).....	26

RESUMEN

El objetivo de este estudio fue caracterizar los grupos funcionales presentes en suspensiones de grafeno en etanol y dimetilformamida (DMF), mediante espectroscopia infrarroja. La caracterización de grupos funcionales presentes en suspensiones de grafeno en etanol y dimetilformamida se realizó con la técnica de espectroscopia infrarroja la cual nos permite identificar grupos funcionales adheridos a cualquier material tanto en estado sólido, líquido o gaseoso, mediante su espectro vibracional de transmitancia en el rango IR del espectro electromagnético, con el fin de hacer medidas en una muestra, se transmitió un rayo monocromo de luz infrarroja a través de la muestra, y se registró la cantidad de energía transmitida, repitiendo esta operación en un rango de longitudes de onda de interés (por lo general, $4000-400\text{ cm}^{-1}$) se pudo construir un gráfico. Al examinar el gráfico de la sustancia, se pudo obtener información sobre la misma. Para el análisis se utilizó el programa OrigiPro en el cual se ingresaron los datos obtenidos por el espectrómetro y realizó el gráfico correspondiente en el rango de 4000 cm^{-1} a 550 cm^{-1} y porcentaje de transmitancia con el cual se pudo caracterizar los grupos funcionales adheridos a la placa de grafeno, el estudio realizado fue clasificado para análisis en etanol y dimetilformamida con tiempos de sonicación de 2h, 5h y 7h respectivamente. Se logró caracterizar los grupos funcionales presentes en las suspensiones de grafeno, entre los cuales se identificaron: compuestos alifáticos, hidroháluros de amina, compuestos carbonílicos, clorhidratos, ácidos carboxílicos, aminas aromáticas, alcoholes, peróxidos y fenoles, que son característicos de interacciones moleculares, resultantes de las vibraciones y elongaciones al interno del material. Se recomienda dar continuidad al estudio de grafeno que hoy en día sigue siendo un tema puntual de estudio que abrirá puertas a nueva tecnología y nuevas herramientas de soporte fundamental en la investigación.

Palabras clave: <BIOFÍSICA>, <GRAFENO>, <ETANOL>, <DIMETILFORMAMIDA>, <GRUPOS FUNCIONALES>, <ESPECTROSCOPIA INFRARROJA>, <TRASMITANCIA>.

LUIS ALBERTO
CAMINOS
VARGAS

Firmado digitalmente por LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Nombre de reconocimiento (DN):
c=EC, l=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974,
cn=LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Fecha: 2021.03.31 08:44:34 -05'00'



0894-DBRAI-UTP-2021

ABSTRACT

The aim of this study was to characterise the functional groups present in graphene suspensions in ethanol and dimethylformamide (DMF) by infrared spectroscopy. The characterisation of functional groups present in graphene suspensions in ethanol and dimethylformamide was carried out with the infrared spectroscopy technique, which allows us to identify functional groups attached to any material in solid, liquid or gaseous state, by means of its vibrational transmittance spectrum in the IR range of the electromagnetic spectrum on a sample, a monochromatic beam of infrared light was transmitted through the sample, and the amount of energy transmitted was recorded, repeating this operation over a range of wavelengths of interest (typically 4000-400 cm^{-1}) a graph could be constructed. By examining the graph of the information about the substance could be obtained. For the analysis, the OriginPro programme was used to enter the data obtained by the spectrometer and create the corresponding graph in the range of 4000 cm^{-1} to 550 cm^{-1} and percentage transmittance, with which the functional groups adhered to the graphene plate could be characterised. The study was classified for analysis in ethanol and dimethylformamide with sonication times of 2h, 5h and 7h respectively. It was possible to characterize the functional groups present in the graphene suspensions were identified: aliphatic compounds, amine hydrohalides, carbonyl compounds, chlorhydrates, carboxylic acids, aromatic amines, alcohols, peroxides and phenols, which are characteristic of molecular interactions resulting from vibrations and elongations within the material. It is recommended to give continuity to the study of graphene, which today is still a timely topic of study that will open doors to new technology and new tools of fundamental support in research.

Keywords: <BIOPHYSICS>, <GRAPHENE>, <ETHANOL>, <DIMETHYLFORMAMIDE>, <FUNCTIONAL GROUPS>, <INFRARED SPECTROSCOPY>, <TRASMITTANCE>.

INTRODUCCIÓN

El grafeno es un material constituido en su composición química exclusivamente por átomos de carbono (C), al igual que el grafito, conformando una red cristalina de tipo hexagonal con los átomos de carbono situados en los vértices. La caracterización de grupos funcionales de suspensiones de grafeno mediante espectroscopia infrarroja nos ayuda a analizar si el grafeno conserva sus propiedades y no ha sido alterado ni contaminado durante el estudio.

El presente trabajo de investigación está estructurado en tres capítulos, además de ello como inicio se describe la importancia de realizar esta investigación, así como los antecedentes y los objetivos.

En el capítulo I se detalla los conceptos básicos pero necesarios para realizar esta investigación como es el concepto de grafeno sus propiedades y aplicaciones, el concepto de espectroscopia infrarroja su principio físico y sus modos vibracionales.

En el capítulo II se describe la metodología usada en esta investigación la hipótesis, las variables relacionadas a la investigación, el tamaño de la muestra, su localización, el método usado para la recolección de datos.

En el capítulo III se exponen los resultados correspondientes al utilizar la técnica de espectroscopia infrarroja tanto en DMF como en etanol identificando los grupos funcionales presentes en cada muestra.

Para finalizar se presentan las conclusiones y recomendaciones.

Antecedentes

El grafeno es una molécula bidimensional de un átomo de espesor compuesta exclusivamente por átomos de carbono híbridos sp^2 (Labra López 2012). Fue obtenido por primera vez en 2004 (Novoselov et al. 2014), el grafeno puede ser formalmente considerado como el bloque básico de todos los alótropos de carbono sp^2 , incluyendo grafito, nanotubos de carbono y fullerenos. En particular, el grafito es un conjunto de hojas de grafeno apiladas unas sobre otras y mantenidas unidas por fuerzas débiles de Van der Waals, mientras que los fullerenos y los nanotubos de carbono pueden considerarse como grafitos envueltos, respectivamente.

La estructura del grafeno está libre de defectos, con todos los átomos del mismo tipo, unidos entre sí por enlaces fuertes y flexibles: este es el origen de las extraordinarias propiedades de este material.

Además, los electrones pueden moverse a través de la red de grafeno sin encontrar obstáculos debido a imperfecciones de la estructura y a la presencia de heteroátomos. Como consecuencia, los electrones pueden moverse mucho más rápido que en metales o semiconductores (Mitch 2013).

El grafeno es un material transparente, extremadamente delgado, muy liviano (0,77 mg/m²) impermeable, elástico, flexible y, a la vez, asombrosamente resistente, el grafeno es el mejor conductor de la electricidad conocido y, además, se encuentra en abundancia en la naturaleza, por lo que es económico, recientemente investigadores de la Universidad de Manchester han demostrado que tiene la capacidad de "curarse a sí mismo". Es decir, si la estructura de una lámina de este material se rompe, el grafeno atrae los átomos de carbono que necesita a su alrededor y repara los vacíos, cubriéndolos adecuadamente (Cayambe Guamán y Zambrano Vera 2018).

El grafeno y sus derivados han sido considerados como componentes en campos de aplicación como medicina, electrónica, espintrónica, sensores y celdas solares. Se han propuesto métodos químicos y físicos para la preparación de grafeno.

Ellos incluyen: producción de suspensiones coloidales, métodos electroquímicos, exfoliación micromecánica, deposición química de vapor, crecimiento epitaxial.

El material a analizarse fue el obtenido por los estudiantes Mayra Cayambe y Carlos Zambrano el cual fue resultado de su tesis "OBTENCIÓN DE GRAFENO MEDIANTE EXFOLIACIÓN EN FASE LÍQUIDA Y OPTIMIZACIÓN DE LA FASE EXPERIMENTAL A TRAVÉS DE TRATAMIENTO HIDROTÉRMICO" (Cayambe Guamán y Zambrano Vera 2018), de la cual nos basamos para realizar esta investigación.

Planteamiento del problema

Enunciado del problema

Según diversos estudios locales, determinados factores promueven la innovación tecnológica nacional a través de la cooperación del sistema educativo, los ejes de investigación de la educación superior, el financiamiento, las exenciones fiscales, los subsidios económicos y la cooperación entre el sector público y privado.

Cabe destacar los esfuerzos del Estado ecuatoriano por promover la producción, el desarrollo y la innovación en el campo de la ciencia de los materiales, pero aún existen discrepancias entre la problemática de los sectores productivos locales y la academia.

El "Plan de Investigación ESPOCH 2017-2021" incluye 8 macro ejes de investigación: 1 gestión sostenible de los recursos naturales, 2 arte, cultura y patrimonio, 3 energías alternativas y renovables y protección del medio ambiente; 4 seguridad y soberanía alimentaria, 5 tecnologías de la información, comunicaciones y procesos industriales, 6 salud y nutrición, 7 administración y economía, 8 movilidad y transporte.

La Escuela Politécnica Superior Chimborazo permite el ingreso al vasto mundo de la nanotecnología y la producción de grafeno con aplicaciones viables como: mejora de materiales en la industria automotriz y de la construcción, funcionalización de polímeros para recubrimiento

de fármacos, desarrollo de portadores de biomoléculas, eliminación de contaminantes (metales pesados, colorantes, gases) y polímeros transparentes con propiedades eléctricas (Cayambe Guamán y Zambrano Vera 2018).

Formulación

¿De qué manera influye la presencia de grupos funcionales mediante la caracterización de suspensiones del grafeno en etanol y dimetilformamida (DMF) a través de un estudio de espectroscopia infrarroja?

Justificación

La caracterización de los grupos funcionales es una técnica que ayuda a identificar la presencia o ausencia de grupos funcionales en ciertos números de onda.

Esta investigación busca evaluar la presencia de grupos funcionales en suspensiones del grafeno, ya que de existir contribuirían a que el grafeno haga enlaces al estar en contacto con las sustancias como etanol y dimetilformamida (DMF) y estos cambien ciertas características las cuales podrían afectar a sus propiedades electrónicas y eléctricas, para lo cual se necesita conocer si al existir grupos funcionales, y al caracterizarlos se podrá realizar estudios posteriores.

La cuantificación de los grupos funcionales es posible mediante la espectroscopía basada en la transmitancia de energía la cual produce que las moléculas adopten un movimiento vibracional característica de cada molécula con ello se puede ver el espectro producido por cada una de ellas que son como una huella dactilar ya que cada espectro es único para cada elemento, con esto se puede identificar con mayor efectividad. Con la ayuda del tratamiento de datos se procederá a caracterizar los datos obtenidos por la espectroscopia infrarroja y se los llevará a un análisis para determinar cuáles son los grupos funcionales presentes en las suspensiones del grafeno.

OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN

Objetivo general

Caracterizar los grupos funcionales presentes en suspensiones de grafeno en etanol y dimetilformamida (DMF).

Objetivos específicos

- Evaluar las suspensiones de grafeno en etanol y dimetilformamida (DMF), utilizando el equipo de espectroscopia infrarrojo.
- Analizar los datos obtenidos.
- Representar y discutir los resultados representativos obtenidos mediante gráficos del grafeno.

CAPÍTULO I

1 MARCO TEÓRICO

1.1 Grafeno

El grafeno se define como una fina lámina plana de átomos de carbono con hibridación sp^2 en dos dimensiones (2D), (Figura 1-1), formando una estructura similar a un panel de abeja. Fue aislado por primera vez en el año 2004, por los físicos Andre K. Geim y Konstantin S. Novoselov, al pegar un trozo de celo sobre la superficie de un grafito, pero no fue hasta el año 2010 cuando el grafeno comenzó a generar interés en el resto de los científicos, al ganar sus descubridores el Premio Nobel de física.

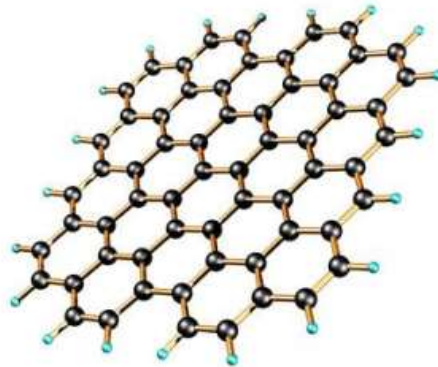


Figura 1-1: Estructura gráfica del grafeno.

Fuente:(Villalón Rodríguez 2016)

El interés del estudio del grafeno es debido a las características únicas del material, como la excelente conductividad eléctrica, su amplia superficie, dureza y una gran conductividad térmica. Además, al proceder de una sustancia natural como el grafito, tiene menor riesgo ambiental que los materiales inorgánicos.

Debido a que tiene un tamaño de 50 nm es considerado un “nanomaterial”. La nanotecnología se basa en el control de la materia a escalas de entre 1 y 100 nanómetros y ha sufrido un gran avance en los últimos años. Uno de sus avances a destacar se encuentra en el campo biomédico, con el uso de materiales con características especiales como los puntos cuánticos (QD) o los nanotubos de carbono, utilizados para la obtención de imágenes o tratamiento de cáncer.

El grafeno y sus derivados, el óxido de grafeno, están siendo estudiados para sus aplicaciones biomédicas como sensores FET/FRET, espectroscopia de masa, diferenciación celular y control de su crecimiento y en el tratamiento del cáncer, entre otros (Villalón Rodríguez 2016).

1.1.1 Estructura del grafeno

El carbono tiene varias formas alotrópicas [1] (Figura 2-1). Los alótropos del carbono pueden ser:

- Tridimensionales – diamante, grafito.
- Bidimensionales – grafeno.
- Monodimensionales – nanotubos.
- Cero dimensionales –fullerenos.

Esta alotropía tan extensa se debe a la capacidad de los átomos de carbono para formar redes muy complicadas, numerosas y diversas estructuras.

El grafeno es una estructura nanométrica bidimensional de átomos de carbono fuertemente cohesivos en una superficie uniforme, ligeramente plana y ondulada, de un átomo de espesor, con una apariencia de panal similar a una capa de panal debido a su configuración atómica hexagonal (Figura 2-1).

Las excepcionales propiedades electrónicas, mecánicas y químicas del grafeno surgen de esta configuración o disposición particular (Salas Galvan 2008).

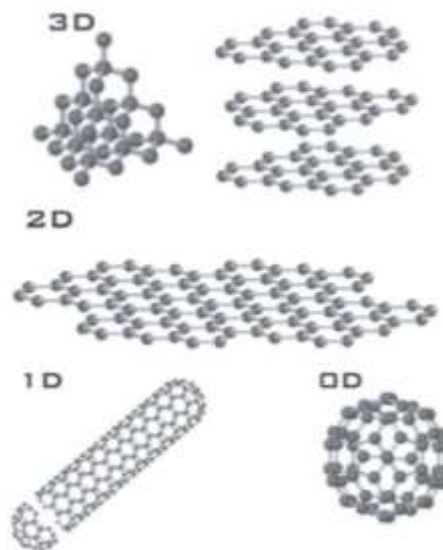


Figura 2-1: Formas alotrópicas del carbono. Grafito (3D); grafeno (2D); nanotubos (1D); fullerenos (0D).

Fuente: (Rodríguez González y Vasilievna Kharissova 2008)

[1] **Alotropía:** Es la propiedad que poseen determinados elementos químicos de presentarse bajo estructuras moleculares diferentes pero para que a un elemento se le pueda denominar como alótropo, sus diferentes estructuras moleculares deben presentarse en el mismo estado físico (Porto Pérez, 2015).

1.1.2 Propiedades del grafeno

El grafeno por definición posee unas características muy interesantes, como su extremada delgadez, lo que le hace ser transparente y al mismo tiempo muy flexible, es uno de los materiales más duros y resistentes. El grafeno también es transcendental por las increíbles propiedades térmicas, electrónicas, ópticas y mecánicas que presenta. Estas propiedades junto a la abundancia de carbono en la naturaleza, han hecho al grafeno ganarse el sobrenombre de “material del futuro” o “material de Dios”(Calle 2017).

Dentro de sus propiedades se describen las siguientes:

1.1.2.1 Es bidimensional

El grafeno se considera un material bidimensional porque está formado por capas muy delgadas de un átomo de espesor, con las que prácticamente solo se aprecian dos de sus dimensiones. Para tener una idea más realista, diríamos que es unas 100.000 veces más fino que el cabello humano(Calle 2017).

1.1.2.2 Es ligero

El grafeno es un material ultraligero. Una hoja de grafeno de 1 m² pesa solo 0,77 mg, que en comparación con el acero (con la misma superficie) pesaría 200 veces menos. Sin embargo, tiene una gran superficie específica de 2600 m²/g, lo que le confiere una cierta capacidad de autoenfriamiento que, a pesar de su resistencia, la hace extremadamente ligera y flexible. Para dar un ejemplo visual, el grafeno es tan espeso que solo un gramo sería suficiente para cubrir por completo un campo de fútbol(Calle 2017).

1.1.2.3 Es flexible

El grafeno es flexible, elástico, maleable. Su constante elástica es enorme, tanto que una lámina de grafeno puede estirarse un 10% de su tamaño normal de forma reversible y puede doblarse hasta un 20% sin sufrir daños, a la vez que puede enrollarse sobre sí misma para crear nanotubos o adoptar cualquier otra forma. Las superficies de los materiales en los que se aplica el grafeno tienen menos riesgo de agrietamiento y por tanto más durabilidad(Calle 2017).

1.1.2.4 Es duro y resistente

El grafeno es un material que supera la dureza del diamante y es 100 veces más resistente que el acero estructural del mismo espesor. Es muy rígido, con lo que soporta grandes fuerzas sin prácticamente ninguna deformación. Tiene una resistencia mecánica de 42 N / m (tensión de rotura), mientras que una hoja de acero más resistente del mismo grosor que el grafeno tendría una resistencia de alrededor de 0,40 N / m. Se estima que para perforar una hoja de grafeno con un objeto puntiagudo, sería necesario llevar un peso de unas cuatro toneladas sobre ella. Para ilustrar mejor estas propiedades mecánicas del grafeno, podríamos utilizar el ejemplo utilizado por sus descubridores en el discurso de entrega del Premio Nobel. “Este material es tan fuerte que

una hipotética hamaca de un metro cuadrado por un metro cuadrado de grafeno podría soportar el peso de un gato sin romperse. La hamaca pesaría menos de 1mg, continuando con la analogía, menos de uno de los pelos del bigote del gato " (Calle 2017).

1.1.2.5 Es transparente

En cuanto a propiedades ópticas, el grafeno puro es prácticamente transparente, similar al vidrio, debido a su bajo espesor. Una sola hoja de este material absorbe solo $\sim 2.3\%$ de la luz blanca incidente que llega a su superficie. La absorción de luz aumenta a medida que aumenta el número de hojas de grafeno superpuestas es decir, cuantas más hojas componen el grafeno, menos transparente será(Calle 2017).

1.1.2.6 Es conductor eléctrico y térmico

El grafeno es el conductor térmico más conocido y también un excelente conductor eléctrico. Su conductividad térmica es de 5000 W / Km , superior a la del cobre, el diamante o la plata, lo que le permite disipar el calor y soportar intensas corrientes eléctricas sin calentarse. Por otro lado, el grafeno conduce tanto la electricidad como el cobre: su conductividad eléctrica es de $0,96 \cdot 10^8 (\Omega \cdot \text{m}^{-1})$, mientras que la del cobre es de $0,60 \cdot 10^8 (\Omega \cdot \text{m}^{-1})$ y la del silicio es de $4,5 \cdot 10^{-4} (\Omega \cdot \text{m}^{-1})$ (Calle 2017).

1.1.2.7 Es híbrido entre semiconductor y metal

Una forma de clasificar los materiales se basa en cómo conducen la electricidad en: conductores, semiconductores y aislantes. El grafeno no es ninguno de los tres, sino que comparte características de conductores y semiconductores. A nivel cuántico, debido a su disposición espacial y al tipo de enlace entre los carbonos que lo componen, los electrones se mueven sobre la superficie del grafeno a una velocidad sin precedentes en cualquier otro material, comportándose como partículas sin masa llamadas fermiones de Dirac (como fotones y fermiones), y la relación resultante entre la energía y su momento es lineal. Se mueven a una velocidad 300 veces más lenta que la de la luz, pero más rápida que la de los electrones en los metales. Comparar la velocidad a la que los electrones se mueven a través del grafeno y el silicio sería como comparar un coche de Fórmula 1 con una bicicleta. Al aumentar su velocidad y eficiencia, el grafeno se calienta menos (tiene un efecto Joule más bajo) y requiere menos energía (es decir, consume menos electricidad) que el silicio para realizar la misma tarea. Esto permite realizar experimentos sobre una pequeña pieza de grafeno que hasta ahora solo se podían realizar en aceleradores de partículas. Por estas razones, el grafeno no se puede clasificar ni como semiconductor ni como metal. Es un híbrido entre los dos materiales que tiene las mejores propiedades de los dos(Calle 2017).

1.1.2.8 Soporta la radiación ionizante

Estudios recientes también han demostrado que el grafeno tiene una alta reactividad química y que cuando la luz incide sobre él emite energía (favoreciendo los electrones) pero no siendo ionizado (es decir, el átomo no se deshace del electrón), por lo que es capaz de resistir la radiación ionizante. La radiación ionizante encuentra aplicación en campos como la salud, en los que se utilizan dispositivos que emiten dicha radiación, como los sistemas de radioterapia, etc (Calle 2017).

1.1.2.9 Es multiplicador de frecuencias:

El grafeno es un multiplicador de frecuencia. Si se le aplica una señal eléctrica de cierta frecuencia, el grafeno genera otra onda de doble o triple frecuencia, lo que le permite operar a frecuencias de reloj mucho más altas que las frecuencias actuales y así aumentar la velocidad y el intercambio de información de los procesadores(Calle 2017).

1.1.2.10 Es denso e impermeable

El grafeno es muy denso, incluso resistente a la penetración de moléculas gaseosas de helio, las más pequeñas que existen. Sin embargo, permite el paso del agua, que cuando está encerrada en un recipiente de grafeno muestra una tasa de evaporación similar a la que se muestra en un recipiente abierto. Geim y su grupo de científicos observaron que una lámina de óxido de grafeno es impermeable a todo tipo de líquidos, vapores y gases excepto al agua(Calle 2017). Las capas de óxido de grafeno dejan espacios que permiten el paso de las moléculas de agua (el H₂O penetra a través de las membranas de óxido de grafeno diez mil millones de veces más rápido que el helio), pero si otras moléculas intentan hacer lo mismo, son retenidas por los capilares de grafeno, que se superponen con el agua. Mediante un experimento, comprobaron que el agua se evapora al mismo ritmo en un recipiente sellado con membranas de grafeno que en un recipiente completamente abierto. Es por ello que otras aplicaciones industriales del grafeno podrían estar relacionadas con la separación y filtración de sustancias, la destilación de determinados líquidos, la producción de biocombustible, la eliminación de toxinas en el agua o la depuración de determinadas sustancias químicas, entre otras (Calle 2017).

1.1.2.11 Es bactericida

Es un material bactericida, capaz de inhibir el crecimiento de microorganismos como bacterias, virus y hongos, pero no afecta el ADN humano y, al ser carbono, se ha demostrado que permite el crecimiento celular, convirtiéndolo en un sustrato con gran potencial para la medicina regenerativa o para la industria alimentaria(Calle 2017).

1.1.2.12 Es biocompatible

Los estudios in vivo sobre la toxicidad del grafeno, todos en poblaciones de ratas por inyección intravenosa e intratraqueal, revelaron que el óxido de grafeno no indica toxicidad aparente para las células biológicas a concentraciones bajas y medias (0,1 mg y 0,25 mg), mientras que las dosis

(0,4 mg) mostró toxicidad crónica, ya que aproximadamente 4 de cada 9 ratones murieron(Calle 2017). Se puede concluir que el grafeno puede ser nocivo para la salud cuando no está funcionalizado debido a los residuos resultantes de su producción. Sin embargo, una vez oxidado y funcionalizado, tiene efectos de estrés oxidativo y es menos viable porque sus dosis y concentración son mayores(Calle 2017).

1.1.2.13 Reacciona con otras sustancias

El grafeno es sensible a cualquier molécula depositada en su superficie y puede reaccionar con otras sustancias para formar compuestos con diferentes propiedades, lo que confiere a este material un gran potencial de desarrollo(Calle 2017).

1.1.2.14 Es autorreparable

La capacidad de autorefrigeración y la capacidad de autocuración son características, que aún están bajo investigación y discusión. Aparentemente, si una capa de grafeno pierde átomos de carbono por alguna razón, los átomos cerca del espacio izquierdo se juntan y lo llenan. Esta capacidad de autocuración podría aumentar la longevidad de los materiales hechos de grafeno, aunque de forma limitada.(Calle 2017).

1.1.3 Aplicaciones del grafeno

Por sus propiedades, el grafeno se puede utilizar como material en la fabricación de aviones, satélites espaciales o coches, lo que los hace más seguros. También en la construcción de edificios, ya que esto los haría más resistentes. Pero sobre todo destacan sus aplicaciones en el campo de la electrónica, donde por su capacidad para almacenar energía puede dotar a las baterías de una mayor duración y un menor tiempo de carga, establecer conexiones más rápidas e incluso ayudar a mejorar el medio ambiente sustituyendo los materiales contaminantes que hoy en día estamos obligados a usar. El grafeno es capaz de generar electricidad mediante energía solar, lo que lo convierte en un material muy prometedor en el campo de las energías limpias. Si los paneles solares se construyeran con grafeno, podrían generar varias veces más energía por hora que los paneles actuales. Sin olvidar su relevancia en el campo de la salud. Su futuro en campos como la medicina parece realmente brillante. La investigación ha demostrado que cuando se funcionaliza, puede usarse para transportar medicamentos, ayudar en la secuenciación del ADN, usarse como biosensor, usarse en la creación de prótesis e incluso podría usarse para mejorar el tratamiento de ciertas enfermedades y rastrear células entorno para la regeneración de tejidos (Calle 2017).

Entre las aplicaciones potenciales del grafeno se pueden citar como las más interesantes:

- Destilación de etanol a temperatura ambiente para combustible y consumo humano.
- Detectores ultrasensibles de gas.
- Moduladores ópticos.

- Transistores de grafeno.
- Circuitos integrados más rápidos y eficientes.
- Electrodo transparentes.
- Dispositivos electrocrómicos.
- Células solares.
- Desalinización.
- Aplicaciones antibacterianas (Parra 2012).

1.2 Espectroscopía Infrarroja IR

La espectroscopía de infrarrojos (IR) es una técnica de análisis de sustancias en el estado gaseoso, líquido o sólido, tanto cristalinas como amorfas, mediante su espectro de absorción o transmitancia en el rango IR del espectro electromagnético, permitiendo así la identificación de compuestos químicos a través de la determinación de la frecuencia a la que los distintos grupos funcionales presentan bandas de absorción en la región IR (Pintado 2013).

Fundamentalmente se emplea para el estudio de compuestos orgánicos, también los compuestos inorgánicos que contienen cationes o aniones poliatómicos dan lugar a espectros de infrarrojo útiles (Universidad de Granada 2004).

Utiliza la radiación del espectro electromagnético cuya longitud de onda (λ) está comprendida entre los 800 y los 400000 nm (0.8 y 400μ $1 \mu = 10^{-4}$ cm) y su efecto sobre la materia orgánica, es producir deformaciones de los enlaces de la sustancia (Figura 3-1). Debido a su gran amplitud se suele dividir en tres zonas:

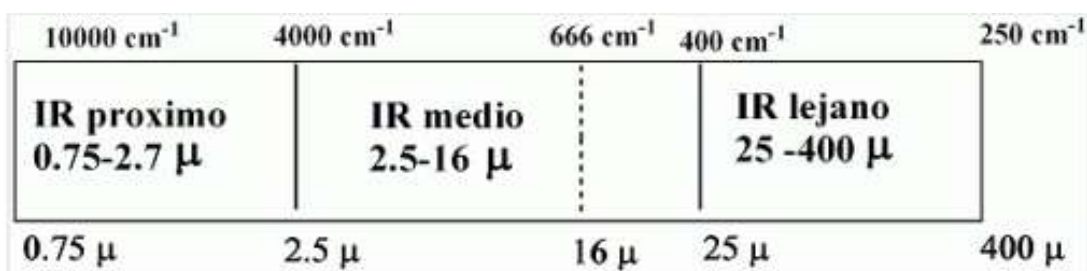


Figura 3-1: Zonas de amplitud del IR

Fuente: (Universidad de Granada 2004).

Siendo el IR medio el normalmente utilizado experimentalmente en determinación estructural (2.5 - 16 μ). Debido a consideraciones de tipo histórico la unidad más usada en la espectroscopia infrarroja no es la longitud de onda (λ) sino el número de onda ($\nu, \nu = 1/\lambda \text{ cm}^{-1}$), correspondiendo el IR medio a la zona comprendida entre 4000 y 625 cm^{-1} (Universidad de Granada 2004).

El aspecto típico de un espectro IR es el que se muestra en la (Figura 4-1):

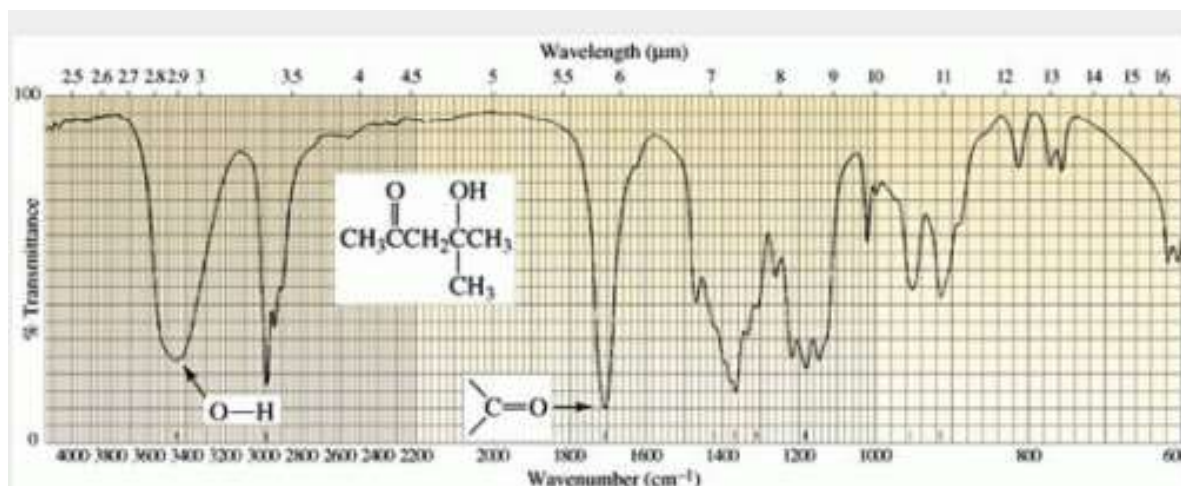


Figura 4-1: Espectro IR

Fuente: (Universidad de Granada 2004)

A la hora de identificar los grupos funcionales con la espectroscopia IR vamos a considerar el espectro de IR dividido en varias zonas:

- De 4000 a 2900 cm^{-1} : Tensión de C-H, O-H y N-H
- De 2500 a 2000 cm^{-1} : Tensión de triples enlaces y dobles enlaces acumulados.
- De 2000 a 1500 cm^{-1} : Tensión de C=O, C=N y C=C.
- De 1500 a 600 cm^{-1} : Zona de la huella dactilar (Flexión de enlaces CH, CO, CN, CC, etc.)(Universidad de Granada 2004).

1.2.1 Modos vibracionales

Hay dos categorías básicas de vibraciones: tensión y flexión. Las vibraciones de tensión son cambios en la distancia interatómica a lo largo del eje del enlace entre dos átomos. Las vibraciones de flexión son causadas por cambios en el ángulo entre dos eslabones. Lo siguiente (Figura 5-1) representa los diferentes tipos de vibraciones moleculares (Universidad de Granada 2004).

Si la molécula recibe luz con la misma energía de esa vibración, la luz será absorbida si se dan ciertas condiciones. Para que una vibración aparezca en el espectro infrarrojo, la molécula debe someterse a un cambio en su momento dipolar durante la vibración. No obstante, las frecuencias de resonancia pueden estar, en una primera aproximación, en relación con la longitud del enlace y las masas de los átomos en cada extremo del mismo. Los enlaces pueden vibrar de seis maneras: estiramiento simétrico, estiramiento asimétrico, tijeras, rotación, giro y wag (Universidad de Granada 2004).

Con el fin de hacer medidas en una muestra, se transmite un rayo monocromo de luz infrarroja a través de la muestra, y se registra la cantidad de energía absorbida. Repitiendo esta operación en un rango de longitudes de onda de interés (por lo general, 4000-400 cm^{-1}) se puede construir un gráfico. Al examinar el gráfico de una sustancia, se puede obtener información sobre la misma.

Cada absorción observable en el espectro corresponde a una vibración determinada de algún enlace dentro de la molécula (Universidad de Granada 2004).



Figura 5-1: Tipo de vibraciones moleculares.
Fuente: (Universidad de Granada 2004).

1.2.2 Principio físico

La interacción de la radiación infrarroja con los estados vibracionales de una molécula sólo es posible si el vector eléctrico de la radiación incidente oscila con la misma frecuencia que el momento dipolar molecular. Una vibración es infrarroja activa únicamente si el momento dipolar molecular puede ser modulado por la vibración normal,

$$\left(\frac{d\mu}{dq}\right)_0 \neq 0 \quad (1)$$

en donde μ es el momento dipolar molecular y q que representa la coordenada normal que describe el movimiento de los átomos durante una vibración normal. Si la condición de la ecuación (1) se cumple (lo cual tiene que ver con la simetría de la molécula), entonces se dice que la vibración es permitida o activa en el espectro infrarrojo; si esta ecuación no se cumple, se dice que la vibración es prohibida o inactiva. Como ya se mencionó, si una molécula presenta un dipolo eléctrico permanente cuando sus núcleos se encuentran en la posición de equilibrio, entonces su momento variará periódicamente durante la vibración. De acuerdo a las leyes clásicas, la molécula debería emitir radiación electromagnética. Si una molécula diatómica presenta un movimiento oscilatorio, de acuerdo con las leyes de selección de la mecánica cuántica dada por:

$$\Delta v = \pm 1 \quad (2)$$

Ya que los niveles de energía son equidistantes, sólo se observará una línea en el espectro infrarrojo. Si el potencial de la molécula no corresponde exactamente al de un oscilador armónico, entonces pueden presentarse transiciones con $\Delta v = \pm 2$, $\Delta v = \pm 3$, etc. Estas transiciones, las cuales son generalmente muy débiles, son llamadas 'sobre armónicos' (Rogelio Murillo 1996).

1.3 Bases conceptuales

1.3.1 Dimetilformamida (DMF)

La dimetilformamida o dimetilformida (DMF) es un compuesto orgánico con la fórmula molecular C_3H_7NO , lo que indica que es un tipo de amida. Las amidas son moléculas polares que sirven como disolventes. Los más populares en la industria de pinturas y tintas son la dimetilacetamida y la N-metilpirrolidona y, por supuesto, la dimetilformamida.

Los disolventes generalmente presentan un alto riesgo debido a su alta inflamabilidad. El DMF penetra en los plásticos y los hace inflamables, lo que lo hace adecuado para la síntesis de péptidos en fase sólida.

La dimetilformamida se utiliza principalmente como disolvente de refuerzo en diversas aplicaciones, como revestimientos protectores, adhesivos y tintas de impresión, y es un componente de muchos decapantes en revestimientos, pinturas, adhesivos y tintas. También se utiliza para fabricar fibras acrílicas y plásticas, acoplar péptidos en productos farmacéuticos e incluso en la formulación de insecticidas (2VS Químicos 2016).

CAPÍTULO II

2 MARCO METODOLÓGICO

2.1 Tipo de la investigación

En esta investigación se utilizó el método de investigación cuantitativa según el objetivo aplicado, según el nivel de profundización en el objeto de estudio exploratoria, según la manipulación de variables experimental.

2.2 Diseño de la investigación

2.2.1 *Diseño experimental*

En esta investigación se utilizó el método cuantitativo debido cuya razón es caracterizar los grupos funcionales presentes en las suspensiones del grafeno multicapa usando espectroscopia infrarroja, dicho trabajo se basará en un diseño experimental.

2.2.1.1 *Identificación de las variables*

Las variables tratar en esta investigación son las siguientes:

Variables dependientes: Grupos funcionales presentes en el grafeno.

Variable independiente: Espectroscopia infrarroja.

2.2.1.2 *Planteamiento de la hipótesis*

La caracterización de los grupos funcionales presentes en las suspensiones del grafeno en etanol y dimetilformamida (DMF), utilizando espectroscopia infrarroja contribuirá a evaluar si el grafeno altero sus características llevando a un cambio en sus propiedades electrónicas y eléctricas.

2.2.1.3 Matriz de consistencia

Tabla 1-2: Matriz de consistencia

PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	VARIABLES
<p>Problema general: ¿Existe la caracterización de grupos funcionales en suspensiones de grafeno?</p> <p>Problemas específico 1: ¿Se presentan grupos funcionales en el estudio de espectroscopia infrarroja?</p> <p>Problemas específico 2: ¿Cómo analizamos efectivamente los datos obtenidos?</p> <p>Problemas específico 3: ¿Cómo interpretar las gráficas obtenidos durante la investigación?</p>	<p>Objetivo general: Caracterizar los grupos funcionales presentes en suspensiones de grafeno en etanol y dimetilformida (DMF).</p> <p>Objetivos específicos 1: Evaluar las suspensiones de grafeno en etanol y dimetilformida (DMF), utilizando el equipo de espectroscopia infrarroja.</p> <p>Objetivos específicos 2: Analizar los datos obtenidos.</p> <p>Objetivos específicos 3: Representar y discutir los resultados representativos obtenidos mediante gráficos del grafeno.</p>	<p>Hipótesis general: La existencia de grupos funcionales adheridos al grafeno se caracterizará mediante espectroscopia infrarroja.</p> <p>Hipótesis específica 1: La espectroscopia infrarroja ayuda a evaluar la presencia de grupos funcionales.</p> <p>Hipótesis específica 2: Los datos obtenidos luego de cada experimentación serán analizados mediante OriginPro, teniendo así un datamiento eficaz.</p> <p>Hipótesis específica 3: Las gráficas obtenidas serán representadas, discutidas y analizadas.</p>	<p>Variable independiente: Espectroscopia infrarroja.</p> <p>Indicadores:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Número de onda • Intensidad <p>Variable dependiente: Grafeno</p> <p>Indicadores:</p> <ul style="list-style-type: none"> • El valor obtenido después de los análisis.

Realizado por: Alvarez, Joel, 2020

2.2.1.4 Operacionalización de las variables

Tabla 2-2: Operacionalización de las variables

VARIABLE	CONCEPTO	INDICADOR	INSTRUMENTO
Variable independiente: Espectroscopia infrarroja.	La espectroscopia infrarroja (IR) es una técnica de análisis de sustancias, mediante su espectro de transmisión, permitiendo así la identificación de compuestos químicos a través de la determinación de la frecuencia a la que los distintos grupos funcionales presentan bandas de absorción en la región IR.	<ul style="list-style-type: none">• Número de onda• Intensidad	Espectrómetro infrarrojo.
Variable dependiente: Grupos funcionales presentes en el grafeno.	El grafeno se define como una fina lámina plana de átomos de carbono con hibridación sp ² en dos dimensiones (2D), formando una estructura similar a un panel de abeja.	El valor obtenido después de los análisis de los números de onda en donde se localicen los grupos funcionales.	Tablas de datos teóricos.

Realizado por: Alvarez, Joel, 2020

2.2.1.5 Localización del estudio

Este estudio experimental se lo realizará en la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo en los laboratorios de óptica y química.

2.2.1.6 Población del estudio

El conjunto de combinaciones válidas para obtener grafeno es finito, por lo tanto, la población es finita.

2.2.1.7 Tamaño de muestra

Las muestras a analizarse fueron de 36 los cuales se almacenan en una matriz para su posterior análisis estadístico, con el objetivo de determinar con el uso de espectroscopía infrarroja la presencia de grupos funcionales en el grafeno.

2.2.1.8 Método de muestreo

El tipo de muestreo aplicado es un tipo de juicio no aleatorio, basado en criterios específicos y en la experiencia de investigadores y tutores. Por cada cambio de variable se analizarán 2 muestras,

cuando la dispersión de datos sea baja, si la dispersión es grande se analizará 1 muestra adicional para determinar si este fenómeno se debe al investigador o a las variables de medida.

2.2.1.9 Preparación de muestras

Se utilizó grafeno resultante de trabajos de titulación (Cayambe Guamán y Zambrano Vera 2018), DMF al 99,8% de pureza y etanol al 99,5% de pureza, adquiridos de Labdin Instruments. Se realizaron 9 muestras para cada solvente respectivamente, variando así el tiempo de sonicación de 2h, 5h y 7h, el tiempo de centrifugación de 5min, 10min y 20 min, y las revoluciones por minuto de 500rpm y 1000rpm respectivamente. El orden que se tomó para medir las muestras fue primero con las muestras de 2h de sonicación y se alternó a 5min, 10 min y 20 min de centrifugado y a 500 rpm y 1000 rpm respectivamente; después se midió con las muestras de 5h de sonicación y se alternó a 5min, 10 min y 20 min de centrifugado y a 500 rpm y 1000 rpm respectivamente; por último se midió con las muestras de 7h de sonicación y se alternó a 5min, 10 min y 20 min de centrifugado y a 500 rpm y 1000 rpm respectivamente.

2.2.1.10 Técnicas de recolección de datos

Caracterización de los grupos funcionales presentes en la suspensión de grafeno mediante espectroscopia infrarroja.

Las múltiples aplicaciones del grafeno nos llevan a diseñar un proceso garantizando su estructura y excluyendo la presencia de grupos funcionales que puedan adherirse al mismo durante su fabricación, se utilizó un espectrofotómetro IR (modelo: Helios Beta, serie: UVB 140113). Nos mostrará un espectro en los rangos de 4000 a 550 cm^{-1} .

Procedimiento

1. Iniciar el programa *SpectraManager* y seleccione *Quick-Start*.
2. Limpiar el área de muestreo ubicada en la parte central interna del equipo con algodón y alcohol.
3. Realizar el *Background* comprobando la ausencia de sustancia en el área de muestreo, cierre la tapa del equipo y presione el botón "*START*" en la parte frontal.
4. Realizar el escaneo espectral colocando la muestra en el vidrio del área de muestra, cierre la tapa y presione "*START*".
5. Procesar el espectro utilizando el programa de "*Spectra Analysis*".
6. Identificar los picos más relevantes presentes en el gráfico.
7. Guardar los datos del espectro para un análisis posterior.
8. Aflojar el tortillo de ajuste, limpiar con algodón y alcohol la zona donde se ha colocado la muestra.
9. Repetir los pasos 4, 5, 6, 7 y 8 para todas las muestras.

10. El procedimiento se repitió un total de 36 veces, 18 con etanol y 18 con DMF respectivamente.

2.2.1.11 Análisis estadístico inferencial

Obteniendo los datos concretos de la caracterización de los grupos funcionales presentes en las suspensiones del grafeno multicapa de una población finita se podrá llegar a la conclusión que con el análisis de los grupos funcionales presentes se podría evaluar las muestras y discutir los resultados.

CAPÍTULO III

3 MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

Se obtuvieron los datos de las muestras analizadas de suspensiones de grafeno multicapa por medio del proceso de espectroscopia infrarroja mediante la transmitancia de energía la cual produce que las moléculas adopten un movimiento vibracional característica de cada molécula con ello se pudo ver el espectro producido por cada una de ellas, y se logró identificar con mayor efectividad los grupos funcionales para DMF y etanol respectivamente.

Los resultados obtenidos son los siguientes:

3.1 DIMETILFORMAMIDA (DMF)

En el gráfico 1-3 se puede observar el espectro infrarrojo de grafeno en DMF en un tiempo de sonicación de 2 horas en el cual se puede apreciar los siguientes grupos funcionales: CH^3 y CH^2 en compuestos alifáticos a causa del CH en estiramiento antisimétrico y simétrico en un número de onda de $2929,34 \text{ cm}^{-1}$, NH^{3+} en hidroháluros de amina debido a los modos de estiramiento del NH con un número de onda de $2361,41 \text{ cm}^{-1}$, $\text{C}=\text{O}$ en compuestos carbonílicos por el estiramiento $\text{C}=\text{O}$ en un número de onda de $1658,48 \text{ cm}^{-1}$, NH^{3+} en aminoácidos o clorhidratos a causa de la deformación del NH^{3+} en un número de onda de $1507,48 \text{ cm}^{-1}$, OH en ácidos carboxílicos debido al doblado del OH en plano en un número de onda de $1439,6 \text{ cm}^{-1}$, CH^3 en compuestos alifáticos a causa de la deformación simétrica del CH^3 en un número de onda de $1382,71 \text{ cm}^{-1}$, C – N en aminas aromáticas a causa del estiramiento C – N en un número de onda de $1252,54 \text{ cm}^{-1}$, C – OH en alcoholes secundarios o terciarios debido al estiramiento C – O en un número de onda de $1085,73 \text{ cm}^{-1}$, Peróxidos a causa del estiramiento del O - O en un número de onda de $861,06 \text{ cm}^{-1}$, C – OH en alcoholes debido al doblado del C – O – H en un número de onda de $658,571 \text{ cm}^{-1}$. En la tabla 3-3, se puede observar los grupos funcionales con su número de onda y %T.

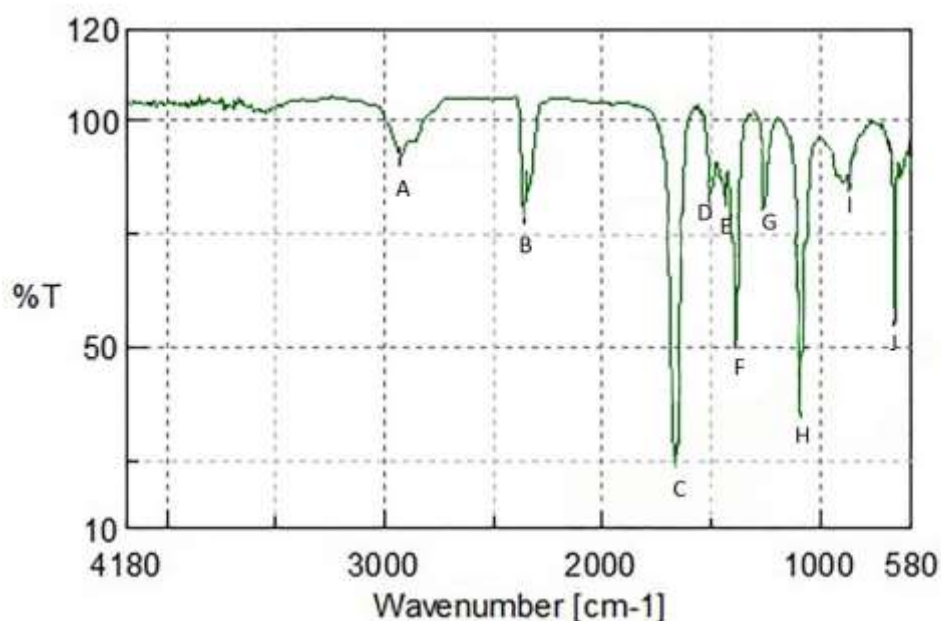


Gráfico 1-3: Espectro infrarrojo Grafeno-DMF (2h)

Realizado por: Joel Alvarez, 2020.

Tabla 3-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-DMF (2h)

Puntos	Número de onda	%T	Grupos funcionales
A	2929,34	91,9356	CH ³ y CH ² en compuestos alifáticos
B	2361,41	79,176	NH ³⁺ en hidroháluros de amina
C	1658,48	23,4245	C=O en compuestos carbonílicos
D	1507,1	84,0697	NH ³⁺ en aminoácidos o clorhidratos
E	1439,6	81,0178	OH en ácidos carboxílicos
F	1382,71	49,1985	CH ³ en compuestos alifáticos
G	1252,54	78,7584	C – N en aminas aromáticas
H	1085,73	37,8216	C – OH en alcoholes secundarios o terciarios
I	861,06	87,9219	Peróxidos
J	658,571	56,5366	C – OH en alcoholes

Fuente:(Shurvell 2006)

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

En el gráfico 2-3 se puede observar el espectro infrarrojo de grafeno en DMF en un tiempo de sonicación de 5 horas en el cual se puede apreciar los siguientes grupos funcionales: CH³ y CH² en compuestos alifáticos a causa del CH en estiramiento antisimétrico y simétrico en un número de onda de 2931,27 cm⁻¹, NH³⁺ en hidroháluros de amina debido a los modos de estiramiento del NH con un número de onda de 2356,59 cm⁻¹, C=O en compuestos carbonílicos por el estiramiento C=O en un número de onda de 1664,27 cm⁻¹, NH³⁺ en aminoácidos o clorhidratos a causa de la deformación del NH³⁺ en un número de onda de 1505,17 cm⁻¹, OH en ácidos carboxílicos debido al doblado del OH en plano en un número de onda de 1436,71 cm⁻¹, CH³ en compuestos alifáticos

a causa de la deformación simétrica del CH^3 en un número de onda de $1386,57 \text{ cm}^{-1}$, C – N en aminas aromáticas a causa del estiramiento C – N en un número de onda de $1253,5 \text{ cm}^{-1}$, C – OH en alcoholes secundarios o terciarios debido al estiramiento C – O en un número de onda de $1094,4 \text{ cm}^{-1}$, Peróxidos a causa del estiramiento del O - O en un número de onda de $866,846 \text{ cm}^{-1}$, C – OH en alcoholes debido al doblado del C – O – H en un número de onda de $659,536 \text{ cm}^{-1}$. En la tabla 3-3, se puede observar los grupos funcionales con su número de onda y %T. En la tabla 4-3, se puede observar los grupos funcionales con su número de onda y %T.

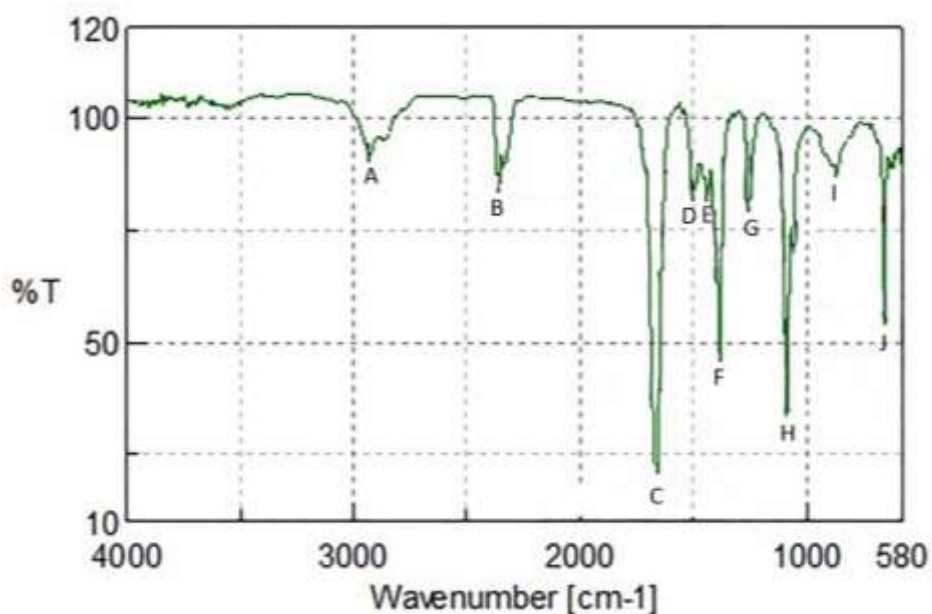


Gráfico 2-3: Espectro infrarrojo Grafeno-DMF (5h)

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

Tabla 4-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-DMF (5h)

Puntos	número de onda	%T	Grupos funcionales
A	2931,27	92,2107	CH^3 y CH^2 en compuestos alifáticos
B	2356,59	85,3174	NH^{3+} en hidroháluros de amina
C	1664,27	20,2019	C=O en compuestos carbonílicos
D	1505,17	83,6757	NH^{3+} en aminoácidos o clorhidratos
E	1436,71	80,2571	OH en ácidos carboxílicos
F	1386,57	45,3997	CH^3 en compuestos alifáticos
G	1253,5	76,7384	C – N en aminas aromáticas
H	1094,4	42,0016	C – OH en alcoholes secundarios o terciarios
I	866,846	85,2664	Peróxidos
J	659,536	59,1517	C – OH en alcoholes

Fuente: (Shurvell 2006).

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

En el gráfico 3-3 se puede observar el espectro infrarrojo de grafeno en DMF en un tiempo de sonicación de 7 horas en el cual se puede apreciar los siguientes grupos funcionales: CH³ y CH² en compuestos alifáticos a causa del CH en estiramiento antisimétrico y simétrico en un número de onda de 2935,13 cm⁻¹, NH³⁺ en hidroháluros de amina debido a los modos de estiramiento del NH con un número de onda de 2362,37 cm⁻¹, C=O en compuestos carbonílicos por el estiramiento C=O en un número de onda de 1660,41 cm⁻¹, NH³⁺ en aminoácidos o clorhidratos a causa de la deformación del NH³⁺ en un número de onda de 1506,13 cm⁻¹, OH en ácidos carboxílicos debido al doblado del OH en plano en un número de onda de 1435,74 cm⁻¹, CH³ en compuestos alifáticos a causa de la deformación simétrica del CH³ en un número de onda de 1386,57 cm⁻¹, C – N en aminas aromáticas a causa del estiramiento C – N en un número de onda de 1257,36 cm⁻¹, C – OH en alcoholes secundarios o terciarios debido al estiramiento C – O en un número de onda de 1092,48 cm⁻¹, Peróxidos a causa del estiramiento del O - O en un número de onda de 863,953 cm⁻¹, C – OH en alcoholes debido al doblado del C – O – H en un número de onda de 659,536 cm⁻¹. En la tabla 5-3, se puede observar los grupos funcionales con su número de onda y %T.

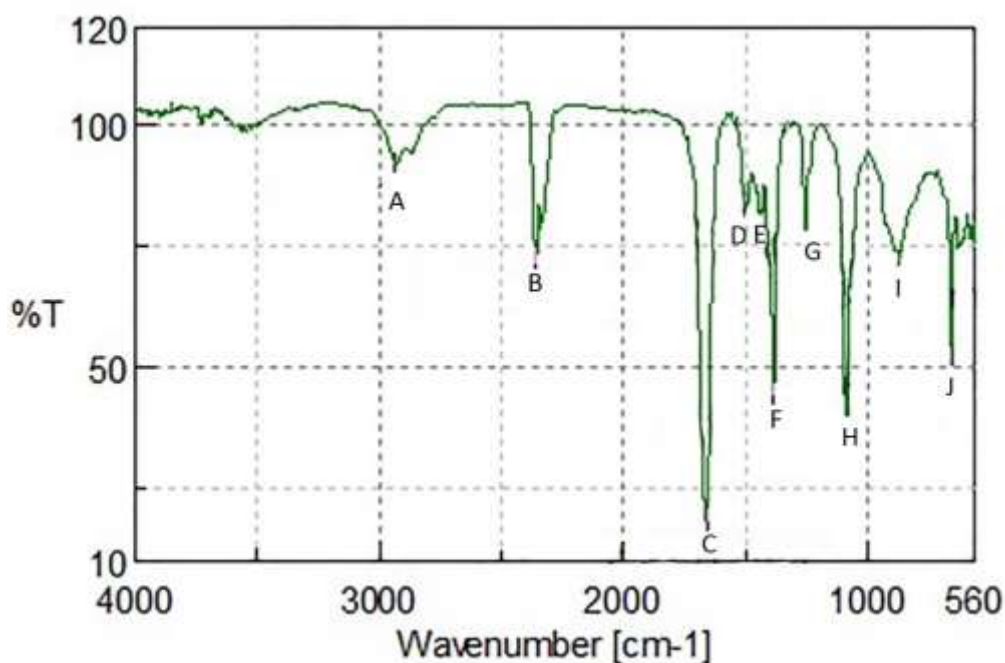


Gráfico 3-3: Espectro infrarrojo Grafeno-DMF (7h)

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

Tabla 5-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-DMF (7h)

Puntos	número de onda	%T	Grupos funcionales
A	2935,13	92,0424	CH ³ y CH ² en compuestos alifáticos
B	2362,37	72,2529	NH ³⁺ en hidroháluros de amina
C	1660,41	18,3635	C=O en compuestos carbonílicos
D	1506,13	83,0475	NH ³⁺ en aminoácidos o clorhidratos

E	1435,74	80,007	OH en ácidos carboxílicos
F	1386,57	44,3723	CH ³ en compuestos alifáticos
G	1257,36	75,9716	C – N en aminas aromáticas
H	1092,48	37,6294	C – OH en alcoholes secundarios o terciarios
I	863,953	71,3956	Peróxidos
J	659,536	52,1944	C – OH en alcoholes

Fuente: (Shurvell 2006).

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

3.2 ETANOL

En el gráfico 4-3 se puede observar el espectro infrarrojo de grafeno en etanol en un tiempo de sonicación de 2 horas en el cual se puede apreciar los siguientes grupos funcionales: OH en alcoholes y fenoles a causa del estiramiento del OH en un número de onda de 3333,36 cm⁻¹, OH en ácidos carboxílicos debido al estiramiento del OH unido a H con un número de onda de 2974,66 cm⁻¹, CH³ y CH² en compuestos alifáticos por el estiramiento del CH antisimétrico y simétrico en un número de onda de 2884,99 cm⁻¹, CH³ en compuestos alifáticos a causa de la deformación antisimétrica CH³ en un número de onda de 1376,93 cm⁻¹, C – OH en alcoholes secundarios o terciarios debido al estiramiento del C – O en un número de onda de 1087,66 cm⁻¹, CH² –OH en alcoholes primarios a causa del estiramiento del C – O en un número de onda de 1043,3 cm⁻¹, Peróxidos a causa del estiramiento del O - O en un número de onda de 883,238 cm⁻¹, C – OH en alcoholes debido al doblado del C – O – H en un número de onda de 629,644 cm⁻¹. En la tabla 6-3, se puede observar los grupos funcionales con su número de onda y %T.

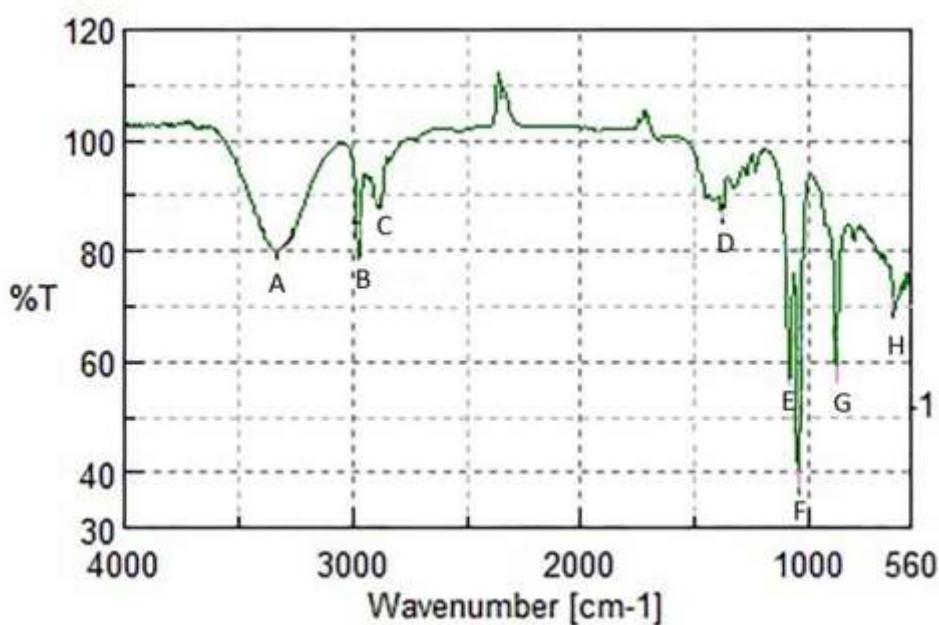


Gráfico 4-3: Espectro infrarrojo Grafeno-Etanol (2h)

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

Tabla 6-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-Etanol (2h)

Puntos	Número de onda	%T	Grupos Funcionales
A	3333,36	80,0031	OH en alcoholes y fenoles
B	2974,66	76,4227	OH en ácidos carboxílicos
C	2884,99	87,3235	CH ³ y CH ² en compuestos alifáticos
D	1376,93	86,593	CH ³ en compuestos alifáticos
E	1087,66	54,9813	C – OH en alcoholes secundarios o terciarios
F	1043,3	38,716	CH ² –OH en alcoholes primarios
G	883,238	57,5058	Peróxidos
H	629,644	69,638	C – OH en alcoholes

Fuente: (Shurvell 2006).

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

En el gráfico 5-3 se puede observar el espectro infrarrojo de grafeno en etanol en un tiempo de sonicación de 5 horas en el cual se puede apreciar los siguientes grupos funcionales: OH en alcoholes y fenoles a causa del estiramiento del OH en un número de onda de 3327,57 cm⁻¹, OH en ácidos carboxílicos debido al estiramiento del OH unido a H con un número de onda de 2974,66 cm⁻¹, CH³ y CH² en compuestos alifáticos por el estiramiento del CH antisimétrico y simétrico en un número de onda de 2884,99 cm⁻¹, CH³ en compuestos alifáticos a causa de la deformación antisimétrica CH³ en un número de onda de 1381,75 cm⁻¹, C – OH en alcoholes secundarios o terciarios debido al estiramiento del C – O en un número de onda de 1092,48 cm⁻¹, CH² –OH en alcoholes primarios a causa del estiramiento del C – O en un número de onda de 1048,12 cm⁻¹, Peróxidos a causa del estiramiento del O - O en un número de onda de 878,417 cm⁻¹, C – OH en alcoholes debido al doblado del C – O – H en un número de onda de 624,823 cm⁻¹. En la tabla 7-3, se puede observar los grupos funcionales con su número de onda y %T.

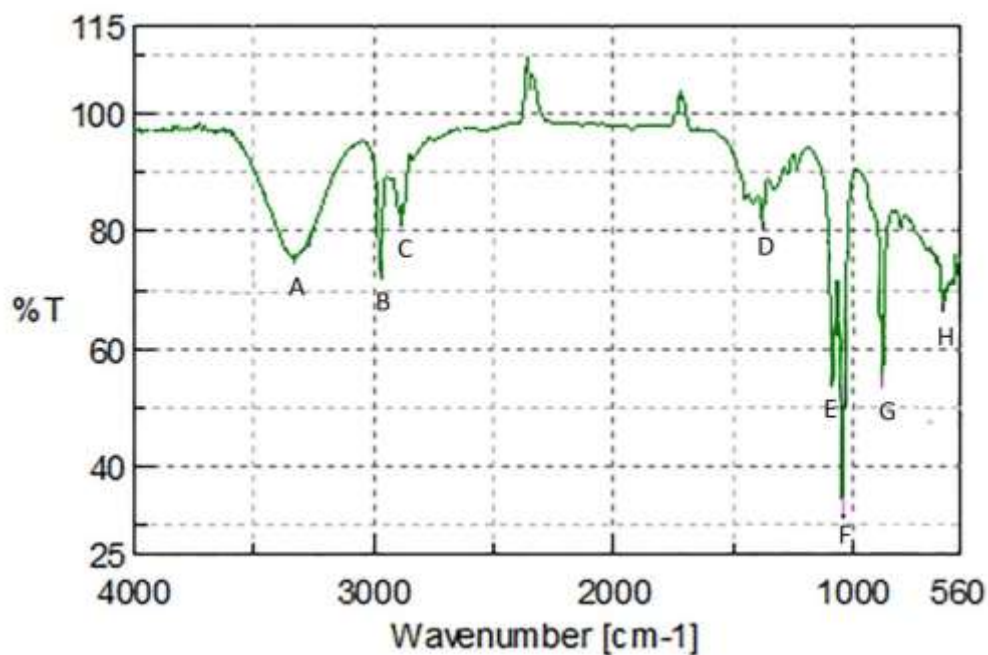


Gráfico 5-3: Espectro infrarrojo Grafeno-Etanol (5h)

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

Tabla 7-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-Etanol (5h)

Puntos	Número de onda	%T	Grupos Funcionales
A	3327,57	75,7556	OH en alcoholes y fenoles
B	2974,66	71,5457	OH en ácidos carboxílicos
C	2884,99	82,4799	CH ³ y CH ² en compuestos alifáticos
D	1381,75	81,9789	CH ³ en compuestos alifáticos
E	1092,48	56,6036	C – OH en alcoholes secundarios o terciarios
F	1048,12	33,1266	CH ² –OH en alcoholes primarios
G	878,417	54,2531	Peróxidos
H	624,823	68,0802	C – OH en alcoholes

Fuente: (Shurvell 2006).

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

En el gráfico 6-3 se puede observar el espectro infrarrojo de grafeno en etanol en un tiempo de sonicación de 7 horas en el cual se puede apreciar los siguientes grupos funcionales: OH en alcoholes y fenoles a causa del estiramiento del OH en un número de onda de 3329,5 cm⁻¹, OH en ácidos carboxílicos debido al estiramiento del OH unido a H con un número de onda de 2973,7 cm⁻¹, CH³ y CH² en compuestos alifáticos por el estiramiento del CH antisimétrico y simétrico en un número de onda de 2883,06 cm⁻¹, CH³ en compuestos alifáticos a causa de la deformación antisimétrica CH³ en un número de onda de 1380,78 cm⁻¹ C – N en aminas aromáticas debido al estiramiento del C – N en un número de onda de 1236,15 cm⁻¹, C – OH en alcoholes secundarios o terciarios debido al estiramiento del C – O en un número de onda de 1090,55 cm⁻¹, CH² –OH

en alcoholes primarios a causa del estiramiento del C – O en un número de onda de 1046,19 cm^{-1} , Peróxidos a causa del estiramiento del O - O en un número de onda de 880,345 cm^{-1} , C – OH en alcoholes debido al doblado del C – O – H en un número de onda de 624,823 cm^{-1} . En la tabla 8-3, se puede observar los grupos funcionales con su número de onda y %T.

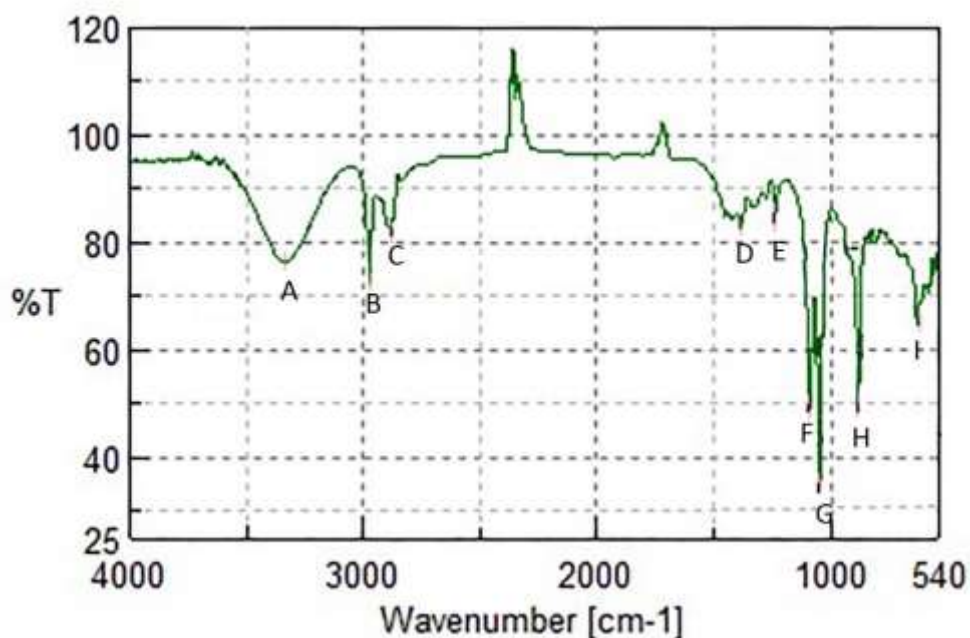


Gráfico 6-3: Espectro infrarrojo Grafeno-Etanol (7h)

Realizado por: Joel Alvarez, 2020

Tabla 8-3: Grupos funcionales presentes Grafeno-Etanol (7h)

Puntos	Número de onda	%T	Grupos Funcionales
A	3329,5	76,521	OH en alcoholes y fenoles
B	2973,7	72,1668	OH en ácidos carboxílicos
C	2883,06	82,8053	CH ³ y CH ² en compuestos alifáticos
D	1380,78	81,835	CH ³ en compuestos alifáticos
E	1236,15	85,4668	C – N en aminas aromáticas
F	1090,55	50,134	C – OH en alcoholes secundarios o terciarios
G	1046,19	35,3834	CH ² –OH en alcoholes primarios
H	880,345	50,4671	Peróxidos
I	624,823	66,1989	C – OH en alcoholes

Fuente: (Shurvell 2006).

Realizado por: Joel Alvarez, 2021

4 CONCLUSIONES

- Se logró caracterizar los grupos funcionales presentes en las suspensiones de grafeno, entre los cuales se identificaron: compuestos alifáticos, hidroháluros de amina, compuestos carbonílicos, clorhidratos, ácidos carboxílicos, aminas aromáticas, alcoholes, peróxidos y fenoles, que son característicos de interacciones moleculares, resultantes de las vibraciones y elongaciones al interno del material.
- Se evaluó a través de la técnica de espectroscopía infrarrojo las suspensiones de grafeno de etanol y de dimetilformamida, en el cual se presencié grupos funcionales a diferentes horas de sonicación, esta presencia de grupos funcionales nos indica impureza en las muestras de grafeno lo cual altera las propiedades del material.
- Los datos obtenidos del estudio de muestras de suspensiones de grafeno en el espectrómetro infrarrojo fueron analizados, para lo cual se realizó un preprocesamiento de los datos con la ayuda del programa OriginPro, se obtuvieron las gráficas en función de la transmitancia y el número de onda, eligiendo un rango entre 4000cm^{-1} y 550cm^{-1} que comprende el infrarrojo medio, en este rango se pudieron estudiar vibraciones fundamentales en las estructuras.
- Los resultados fueron representados mediante gráficas para visualizar la presencia de los grupos funcionales presentes en las suspensiones de grafeno tanto en etanol como en dimetilformamida, con el apoyo de bibliografía especializada y previamente seleccionada se pudo caracterizar los grupos funcionales.

5 RECOMENDACIONES

- Se recomienda dar continuidad al estudio de grafeno que hoy en día sigue siendo un tema puntual de estudio que abrirá puertas a nueva tecnología y nuevas herramientas de soporte fundamental en la investigación.
- Es importante estudiar el grafeno implementando un método de preparación de la muestra que pueda ser propia de la Carrera de Física y caracterizar las muestras para obtener una base de datos más grande, de modo que sea de apoyo para investigaciones de gran alcance a nivel nacional y siendo ambiciosos a nivel internación.

BIBLIOGRAFÍA

2VS QUIMICOS, 2VS Químicos La dimetilformamida en la industria de las pinturas y tintas. [en línea]. 2016. [Consulta: 1 marzo 2021]. Disponible en: <http://www.2vsq.com/post/22/la-dimetilformamida-en-la-industria-de-las-pinturas-y-tintas.Ra>.

CALLE, P., El grafeno: propiedades y aplicaciones. [en línea]. Murcia: 2017. [Consulta: 1 marzo 2021]. Disponible en: www.graphenano.com.

CAYAMBE GUAMÁN, M.E. y ZAMBRANO VERA, C.A., *Obtención de grafeno mediante exfoliación en fase líquida y optimización de la parte experimental a través de tratamiento hidrotérmico* [en línea]. S.I.: ESCUELA SUPERIOR POLITECNICA DE CHIMBORAZO. 2018. [Consulta: 1 marzo 2021]. Disponible en: <https://1library.co/document/y8gr334z-obtencion-mediante-exfoliacion-liquida-optimizacion-experimental-tratamiento-hidrotermico.html>.

LABRA LÓPEZ, L.I., Métodos de preparación de grafeno y derivados a partir de grafito y su incursión en la obtención de nanocompuestos polímero/grafeno. [en línea]. Saltillo, Coahuila: 2012. [Consulta: 1 marzo 2021]. Disponible en: [https://ciqa.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1025/460/1/Lorena Idaly Labra Lopez.pdf](https://ciqa.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1025/460/1/Lorena%20Idaly%20Labra%20Lopez.pdf).

MITCH, J., Graphene: Carbon As Thin As Can Be. . S.I.: 2013.

NOVOSELOV, K.S., GEIM, A.K., MOROZOV, S. V., JIANG, D., DUBONOS, S. V., GRIGORIEVA, I. V. y FIRSOV, A.A., Electric field effect in atomically. *sci-hub* [en línea], vol. 1. 2014. Disponible en: <https://sci-hub.cc/www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/15499015>.

PARRA, V., El Grafeno propiedades características y aplicaciones. [en línea]. S.I.: 2012. Disponible en: <https://www.seas.es/blog/automatizacion/el-grafeno-propiedades-caracteristicas-y-aplicaciones/>.

PINTADO, F., Espectroscopia Infrarroja. [en línea]. S.I.: 2013. Disponible en: <http://www.incar.csic.es/espectroscopia-ir>.

RODRÍGUEZ GONZÁLEZ, C.M. y VASILIEVNA KHARISSOVA, O., Propiedades y aplicaciones del grafeno. *Monterrey : s.n.*, vol. XI, pp. 38. 2008.

ROGELIO MURILLO, R.G., Espectroscopia Infrarroja. [en línea]. S.I.: 1996. Disponible en: <http://sistemas.fciencias.unam.mx/~fam/Infrarroja.pdf>.

SALAS GALVAN, H., PIA Materiales - Resumen Mecánica - StuDocu. [en línea]. 2008. [Consulta: 1 marzo 2021]. Disponible en: <https://www.studocu.com/es->

mx/document/universidad-autonoma-de-nuevo-leon/mecanica/resumenes/pia-materiales-resumen-mecanica/7377955/view.

SHURVELL, H.F., Spectra- Structure Correlations in the Mid- and Far-Infrared. *Handbook of Vibrational Spectroscopy*, 2006. DOI 10.1002/0470027320.s4101.

UNIVERSIDAD DE GRANADA, Espectroscopia infrarroja. [en línea]. S.l.: 2004. Disponible en: <https://www.ugr.es/~quioired/espec/ir.htm>.

VILLALÓN RODRÍGUEZ, A., Grafeno. [en línea]. S.l.: 2016. Disponible en: <http://147.96.70.122/Web/TFG/TFG/Memoria/ALBA RODRIGUEZ VILLALON.pdf>.



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS PARA EL
APRENDIZAJE Y LA INVESTIGACIÓN**



UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS
REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 13/04/2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: Joel Omar Alvarez Veintimilla
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Biofísica
Título a optar: Biofísico
f. Analista de Biblioteca responsable: Lic. Luis Caminos Vargas Mgs.

**LUIS
ALBERTO
CAMINOS
VARGAS**

Firmado digitalmente por LUIS
ALBERTO CAMINOS VARGAS
Nombre de reconocimiento
(DN): c=EC, I=RIOBAMBA,
serialNumber=0602766974,
cn=LUIS ALBERTO CAMINOS
VARGAS
Fecha: 2021.04.13 12:26:20
-05'00'



0894-DBRAI-UTP-2021