



## EFECTO DEL SOLVENTE SOBRE BIOMATERIALES AMORFOS: UN ESTUDIO MECÁNICO ESTADÍSTICO DE LA ESTABILIDAD

Enrique Lemus Fuentes, Universidad Tecnológica de la Mixteca, Huajuapán de León, Oax., 69000, 953 5320214, elf@mixteco.utm.mx.

*Palabras clave: mecánica estadística, amorpho, estabilidad.*

**Introducción.** La transición vítrea es crucial en el procesamiento y en la estabilidad por periodos prolongados de tiempo de alimentos, farmacéuticos y materiales biológicos [1]. En muchos casos, la estabilidad prolongada es a menudo sinónimo de baja movilidad molecular. Para este estudio, se escogió al ibuprofeno como material farmacéutico y al bacalao como alimento. Varias técnicas analíticas fueron exploradas para confirmar la estabilidad en muestras amorfas tales como; dispersión de rayos X a ángulos rasantes, espectroscopia Raman y dispersión de neutrones. Se estudió en particular el pico bosónico.

El objetivo de este trabajo fue obtener la densidad de estados vibracionales de los materiales amorfos estudiados y con esta información estudiar la estabilidad.

**Metodología.** La densidad de estados vibracionales se determinó ajustando datos experimentales de capacidades caloríficas de los materiales seleccionados con los datos obtenidos de la ecuación teórica derivada de la mecánica estadística. Se utilizaron las capacidades caloríficas reportadas por Fen *et al.*, 2005 y la base de datos compilada por Rahman, (1994). Con esta información del ajuste, se derivó una relación general y exacta para la densidad de estados vibracionales de materiales complejos en la transición vítrea. Siguiendo el procedimiento de Sokolov *et al.* (1993), la intensidad de luz en el espectro Raman depende de la densidad de estados vibracionales, dado por

$$I(\nu) = g(\nu)C(\nu)\left(\frac{n(\nu)+1}{\nu}\right) \quad (1)$$

donde  $g(\nu)$  es la densidad de estados vibracionales,  $C(\nu)$  es un coeficiente de acoplamiento de las vibraciones con la luz,  $n(\nu)+1$  es el factor de Bose y  $\nu$  la frecuencia.

**Resultados y discusión.** La figura 1 muestra un espectro arbitrario reproducido por medio de la densidad de estados vibracionales obtenida.

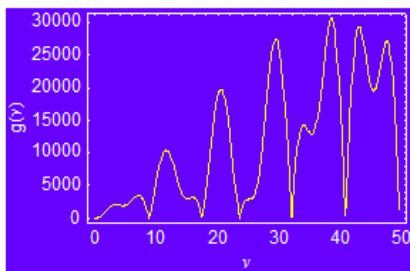


Fig. 1. Densidad de estados vibracionales para un conjunto arbitrario de parámetros

Hay que señalar que el espectro mostrado comparte las características de un espectro real.

La influencia que tiene el grado de hidratación sobre el pico bosónico se muestra en la figura 2, son resultados genéricos simulando distintos contenidos de hidratación. Un menor contenido de solvente se refleja en un abatimiento del pico bosónico, mientras que un contenido mayor de solvente se traduce en una intensificación del pico bosónico

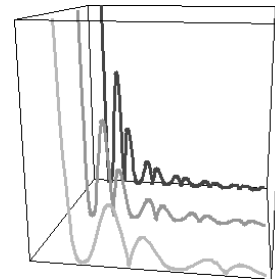


Fig. 2. Pico bosónico con datos simulados de hidratación, los ejes corresponden a frecuencia, humedad e intensidad (mayor hidratación hacia el fondo de la gráfica).

Se atribuye al solvente la movilidad molecular que alcanza el sistema soluto-solvente lo cual se ha podido corroborar analizando el pico bosónico con estudios de dispersión de luz.

**Conclusiones.** Se contribuye a entender el fenómeno de la transición de fase en materiales amorfos al obtener la densidad de estados vibracionales registrada en la transición vítrea. El entendimiento mecanístico del fenómeno de la estabilidad relacionado con la densidad de estados vibracionales y reflejado en la intensidad del pico bosónico le agrega valor a utilizar los datos de capacidad calorífica como un medio rápido de caracterizar la movilidad molecular en sólidos amorfos.

### Bibliografía.

1. Blanshard, J. M. V., Lillford, P. (1993). *The Glassy State in foods*. Nottingham Univ. Press, Nottingham. UK.
2. Fen, L.X., Cheng, Z., Lian, R., Tao, Q. F. (2005). *Acta. Phys. Chim. Sin.* 21: 1-5.
3. Rahman, S. (1995). *Food Properties Handbook*. CRC Press, Boca Ratón, FL, USA.
4. Sokolov, A., Kisliuk, A., Quitmann, D. y Duval, E., (1993). *Phys. Rev. B.* **48**, 7692.