Desempeño de un prototipo estudiantil de espectrofotómetro

RESUMEN

El espectrofotómetro, es un instrumento crucial en disciplinas científicas e industriales, se emplea para analizar a la materia, aprovechando sus propiedades al interactuar con la luz según su longitud de onda. El principio de funcionamiento se basa en la absorción selectiva de luz por las sustancias, a ciertas longitudes de onda, de acuerdo con la Ley de Lambert y Beer, la cual relaciona una medición llamada absorbancia, la concentración a medir y espesor de la muestra. Existen diversas desventajas asociadas al uso de espectrofotómetros comerciales, el principal de ellos es su alto costo. Asimismo, su uso favorece el efecto conocido como de "Caja Negra" que implica el uso de instrumentos sin comprender su funcionamiento interno. Por tales motivos se diseñó un prototipo de espectrofotómetro con componentes de bajo costo, en los que se incluye un apuntador láser de color rojo, un fotorresistor, una resistencia de carbón y un multímetro comercial. El prototipo de espectrofotómetro se basó en la construcción de un circuito conocido como divisor de voltaje, con la finalidad de medir las variaciones en el voltaje del circuito, debido a las variaciones en la resistencia eléctrica ocasionadas por la intensidad de la luz incidente en el fotorresistor después de atravesar la muestra de diferente concentración. Así mismo, se utilizó un espectrofotómetro modelo "Spectronic Educator" que se empleó como equipo de referencia para verificar el funcionamiento del prototipo estudiantil. Para ello se construyeron curvas de calibración mediante el uso diluciones seriadas de tetraminocobre (II) concentración conocida para las pruebas y comparación de funcionamiento el prototipo y el equipo comercial. Se empleó Python para analizar datos, aplicando regresión lineal, coeficiente de Pearson y RMSE. El desempeño del espectrofotómetro comercial y casero se evaluó mediante regresión lineal. Así mismo se llevó a cabo el análisis de regresión entre la respuesta del prototipo frente a la absorbancia del equipo comercial. Ambos mostraron una alta correlación, y la variación entre las pendientes fue aceptable (4.37%). El prototipo estudiantil de espectrofotómetro mostró una relación lineal con el comercial, demostrando una precisión aceptable. La construcción de un prototipo estudiantil de espectrofotómetro es una alternativa rentable y educativa. Aunque se observaron pequeñas discrepancias con el equipo comercial, el prototipo demostró un nivel de precisión aceptable, contribuyendo a la comprensión del funcionamiento del espectrofotómetro.

INTRODUCCIÓN

La espectrofotometría es un conjunto de técnicas basadas en la detección de una cantidad de luz absorbida por una molécula cuando se expone a una determinada longitud de onda. El principio básico de funcionamiento del espectrofotómetro se basa en la absorción de radiación electromagnética basada en su concentración. Cada sustancia tiene su propia banda de absorción a una determinada longitud

de onda. En otras palabras, a una cierta longitud de onda, la concentración de la sustancia en disolución tiene una relación proporcional con el grado de debilitamiento de la energía de la luz después de atravesar la muestra analizada, expresada mediante la ley de Lambert-Beer. Un espectrofotómetro de la región del espectro visible es un instrumento altamente preciso utilizado para analizar propiedades de la materia de acuerdo con su capacidad de absorber luz en función de su longitud de onda. Su configuración básica incluye una fuente de luz, sistema de selección de longitud de onda, muestra a analizar y detector. Fundamental en disciplinas científicas e industriales, se emplea comúnmente para determinar color en la producción y en química analítica para identificar y cuantificar sustancias.

En sitios como Ebay, un espectrofotómetro tiene un costo que va desde los 1500 hasta los 8000 pesos, modelos similares a este equipo rondan aproximadamente los 8000 pesos. Hay que recalcar que un equipo como lo es un espectrofotómetro, da lugar al efecto Caja Negra, este efecto es la forma de hacer referencia a instrumentos científicos que son utilizados sin necesidad de conocer lo que pasa dentro, esto puede generar una problemática, por ejemplo, a estudiantes que están interesados en pruebas de medición ya que al usar uno de estos aparatos no se conocen todos los procesos que se llevan a cabo dentro de un equipo como lo es un espectrofotómetro, esto es básicamente realizar una prueba a ciegas.

Este trabajo está centrado en diseñar y comprobar la eficacia de un prototipo estudiantil de espectrofotómetro a comparación de uno especializado, esta idea nace de economizar un equipo de laboratorio y hacer pruebas para darnos cuenta de que se pueden obtener resultados bastante favorables con un margen de precisión bastante alto por lo que el prototipo estudiantil puede ser una opción viable si lo que se busca es medir concentraciones con un equipo de bajo costo. Esto fue logrado ya que el prototipo de compuso de un multímetro (500 pesos), un fotorresistor (8 pesos), una resistencia de 1000 ohms (1 peso), un par de caimanes (10 pesos) y una pila de 1.5 volts (20 pesos), esto dió un precio total de 539 pesos.

MARCO TEÓRICO

Ley de Lambert-Beer

La Ley de Lambert-Beer, (Ec.1) se aplico directamente en el prototipo del espectrofotómetro que ha desarrollado para medir la concentración en diversas dilucioness de tetraminocobre II. Esta ley establece que la absorbancia (A) es directamente proporcional a la concentración (c) de la sustancia en la solución y al espesor (b) de la muestra.

Ecuación 1. Ley de Lambert-Beer A=ε·b·c

En donde:

- 1. Absorbancia (A): representa la cantidad de luz absorbida por las muestras de Sulfato Cúprico en nuestro prototipo estudiantil de espectrofotómetro.
- 2. Concentración (c): corresponde a las diferentes concentraciones de cobre presentes en las muestras de Sulfato Cúprico.
- 3. Coeficiente de absorción molar (ε): corresponde a una medida de la intensidad con la que una especie química absorbe, y por tanto atenúa, la luz a una longitud de onda determinada.
- 4. Espesor de la muestra (b):en nuestro caso, el espesor de la muestra está asociado con la longitud del camino óptico de la luz a través de las muestras, determinado por el ancho de la celda de medición y representa la longitud de la trayectoria del láser a través de la disolución de sulfato de tetraminocobre (II).

Circuito divisor de voltaje

Un circuito divisor de voltaje es una configuración común en la electrónica que permite obtener una fracción de un voltaje de entrada utilizando resistencias. La construcción del prototipo del espectrofotómetro se basó en un circuitp divisor de voltaje (Fig. 1) y consitión en la conexión en serie de un resistor de carbón de 1000 ohms (R1) y un fotoresistor (R2) acoplada a una pila AA para suministrar el voltaje de entrada (Ve) y en los bornes del R2 poder medir el voltaje de salida (Vs) con un multímetro

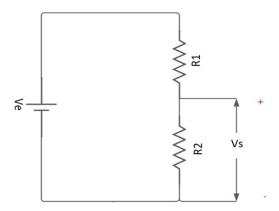


Figura 1. Se diagrama de un circuito divisor de voltaje. En el presente trabajo se utilizó un circuito divisor de voltaje en el desarrollo del prototipo estudiantil de espectrofotómetro en donde la R2 consistió en un fotorresistor

Dado que en el circuito se puede medir Vs y Ve y se conoce el valor de R1 es posible calcular el valor de R2, que en este caso, es la resistencia conferida al circuito que depende de la intensidad de la luz incidente sobre el resistor. Dichos cálculos se basaron en la ecuacion que establece el V_s para un circuito divisor de voltaje $V_s = (V_e \times R_2)/(R_1 + R_2)$

Operación del prototipo del espectrofotómetro

Como variable de respuesta del prototipo, análoga a la absorbancia medida con un espectrofotómetro comercial, se calculó el logaritmo natural de la resistencia correspondiente al fotorresistor durante la operación del prototipo (Ec. 1).

Ecuación 1. Variable de respuesta del espectrómetro casero

$$Ln\left(\frac{R_1 \times V_S}{(V_S - V_e)}\right)$$

Operación de un espectrofotómetro comercial

Para el desarrollo de este experimento, se utilizó un espectrofotómetro que se encontraba en el plantel, modelo "Spectronic Educator" de la marca Milton Roy, un producto descontinuado pero que ofrece buenos resultados.

Objetivos

Objetivo general

Construir y analizar el desempeño de prototipo estudiantil de espectrofotómetro frente a un equipo comercial.

Objetivos particulares

- 1. Construir un espectrofotómetro con componentes electrónicos de bajo costo.
- 2. Construir una curva de calibración con un espectrofotómetro comercial para evaluar su precisión.
- 3. Construir una curva de calibración con un prototipo estudiantil de espectrofotómetro para evaluar su precisión.
- 4. Comparar el desempeño del prototipo estudiantil de espectrofotómetro frente al espectrofotómetro comercial.

Metodología

Materiales y reactivos

Para la realización del prototipo estudiantil de espectrofotómetro se usaron

Materiales: caimanes, carcasa de plástico para cubrir las muestras, celdas de plástico de 1 cm de longitud para espectrofotometría, fotorresistor, matraces aforados de 100mL, multímetro, pila de 1.549 Volts., resistor de carbón de 1000 ohms

Construcción del prototipo

A los cables que se encuentran en el multímetro se conectaron un caimán en cada uno, uno se conectó a una pila de 1.549 volts y el otro se conectó a un receptor, a la pila y al otro extremo se conectó otro par de caminando los cuales iban conectados a un fotorresistor el cual cerraba el circuito. Como se muestra en la Imagen 2.

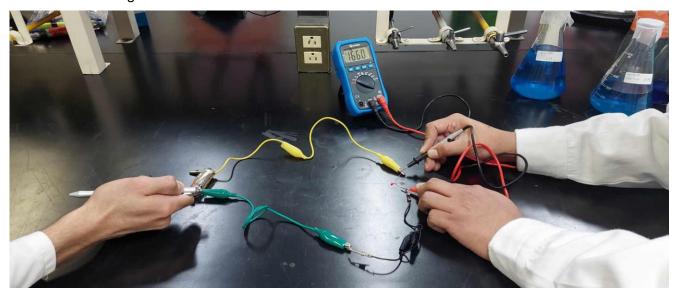


Figura 2. Prototipo del espectrofotómetro Se observa que el Vs = 0.166 volts a partir de una pila AA con un Ve = 1.5 volts al hacer incidir un haz de luz roja mediante un apuntador láser en el fotorresistor.

Preparación de las diluciones seriadas de tetraminocobre II

Para las mediciones de este trabajo se utilizó una disolución de tetraminocobre (II) ([Cu[NH3]4]+SO4) obtenido a partir la mezcla de sulfato cúprico 1.5 M(CuSO₄) con hidróxido de amonio concentrado(NH₃) en diferentes proporciones (Tabla 1). La longitud de onda para el tetraminocobre (II), se ubica alrededor de los 620-640 nm, por lo que este compuesto resulta óptimo para el prototipo.

Tabla 1. Preparación de diluciones seriadas de tetraminocobre II)

Matraz	CuSO ₄ 1.5M (mL)	NH ₄ OH conc (mL)	Aforo con H ₂ O (mL)
1	0	20	100
2	2	20	100
3	4	20	100
4	6	20	100

Figura 2. Diluciones seriadas de tetraminocobre II Se muestran las soluciones de $[Cu[NH_3]_4]SO_4H_2O]$ preparadas a partir de las disoluciones de $CuSO_4$ y NH_4OH , se observa que la concentración afecta al tono que toma cada disolución.



Construcción de las curvas de calibración con el espectrofotómetro comercial

Se calibró el espectrofotómetro comercial utilizando estándares de referencia para asegurar mediciones precisas, registrado la absorbancia correspondiente a cada concentración (Tabla 2).

Tabla 2 . Absorbancia de las diluciones seriadas de acuerdo con su concentración de tetraminocobre (II)

Disolución	Concentración de tetraminocobre II (M)	Absorbancia
1	0	0
2	0.03	0.54
3	0.06	1.05
4	0.09	1.51

Construcción de las curvas de calibración con el prototipo estudiantil de espectrofotómetro

Se calculó la concentración de tetraminocobre (II) a partir de los valores de voltaje medidos por el fotoresistor, utilizando la relación previamente establecida entre el voltaje y la concentración en cada muestra (Tabla 3).

Tabla 3. Respuesta del prototipo de espectrofotómetro al analizar las diluciones seriadas de acuerdo con su concentración de tetraminocobre (II)

Disolución	Concentración de tetraminocobre II (M)	Variable de Respuesta del Prototipo [Ln(R1•Vs/(Vs-Ve)].
1	0	5.6193
2	0.03	5.8893
3	0.06	6,5737
4	0.09	6,9977

Técnicas estadísticas y software empleados

Se obtuvo para caso una curva de calibración, que consiste en un gráfico que sirve para medir la concentración de una sustancia (analito) en una muestra desconocida. Esta curva se obtiene midiendo la respuesta de un instrumento ante varias muestras de concentraciones conocidas. Se utilizó la regresión lineal, ya que permite definir la recta que mejor se ajusta a varios puntos esparcidos en un plano. Este método de regresión por mínimos cuadrados es una estrategia adicional para ajustar adecuadamente el comportamiento o la tendencia general de los datos a través de una recta que minimice la suma de los cuadrados de las distancias verticales de los puntos a la recta. Así mismo, se calculó el coeficiente de correlación de Pearson que mide la dirección y fuerza que tiene una relación entre dos variables, tiene un rango de valores de -1 a 1, este valor entre más se acerque a 1 nos indica una relación aún mayor. Se calculó la desviación estándar de los valores residuales (errores de predicción). Los valores residuales son una medida de la distancia de los puntos de datos de la línea de regresión; RMSE es una medida de cuál es el nivel de dispersión de estos valores residuales.

Lenguaje de Programación Utilizado.

Python es un lenguaje de programación interpretado de alto nivel conocido por su simplicidad, flexibilidad y versatilidad. Creado por Guido van Rossum y lanzado por primera vez en 1991, Python ha obtenido desde entonces una adopción generalizada en varios dominios, incluido el desarrollo web, el análisis de datos, la inteligencia artificial, la informática científica y más. Los datos obtenidos de la investigación se sometieron a un análisis exhaustivo para obtener conocimientos y conclusiones significativas. Se eligió el lenguaje de programación Python como herramienta principal para el análisis

de datos debido a su versatilidad, eficiencia y amplias bibliotecas diseñadas para el análisis estadístico y la manipulación de datos.

Se compararon los resultados de concentración obtenidos mediante el uso del espectrofotómetro y del método casero. Se evaluaron la concordancia entre ambos métodos y se analizó posibles discrepancias. Se destaca que, a pesar de la alta variación en los resultados entre los métodos, los modelos de regresión mostraron resultados muy similares. Se observó una variación alta con precisión alta en los modelos de regresión, lo que sugiere una consistencia en la relación entre las concentraciones medidas y las lecturas de los instrumentos. Por otro lado, el método comercial mostró una variación baja pero precisión alta, lo que indica una menor variabilidad en las lecturas pero una consistencia en la precisión de las mediciones.

Se examinaron las similitudes y diferencias en los valores de concentración obtenidos por cada método, identificando posibles sesgos o tendencias sistemáticas en la medida. Además, se investigaron las posibles causas de las discrepancias observadas y se discutieron las implicaciones de estos hallazgos para la validez y la fiabilidad de los métodos de medición utilizados en el estudio.

Resultados y análisis

Desempeño del espectrofotómetro comercial

De acuerdo con el análisis de regresión lineal (Figura 3) se obtuvo una pendiente de 16.8. Lo que da a entender que cuando se incrementa la concentración en una unidad se espera un incremento en 16.8 unidades de absorbancia. Así mismo se obtuvo un valor de la ordenada al origen de 0.019 (este valor nos muestra un error del equipo de tipo sistemático), lo que nos muestra que si la concentración vale 0, se obtienen 0.019 unidades de absorbancia cuando teóricamente se debería obtener 0.

Respecto al valor del coeficiente de correlación de Pearson que consiste en una medida de asociación entre dos variables, siendo estas variables los valores de absorbancia y concentración, si el valor que arroja es de 1 la asociación es perfecta, en este caso se observó un resultado de 0.999, que nos indica que estos valores están altamente asociados.

El error cuadrático medio (RMSE) mide la cantidad de error que hay entre dos conjuntos de datos, es decir, compara un valor predicho y un valor observado o conocido, en este caso se observó 0.02.

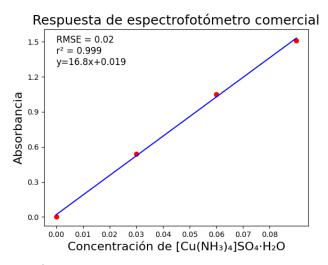


Figura 3. Respuesta de espectrofotómetro comercial: Se muestra la concentración de la sustancia de cobre respecto a las absorbancias obtenidas, junto con su error cuadrado medio (RMSE) y coeficiente de determinación (r²).

Desempeño del prototipo estudiantil de espectrofotómetro

Se observa la recta de regresión lineal donde se obtuvo una pendiente de 16.065 (**Fig. 4**). Así mismo se obtuvo un valor de la ordenada al origen de 5.547. Respecto al valor del coeficiente de correlación de Pearson se observó un resultado de 0.976. El error cuadrático medio (RMSE) arrojó un valor de 0.085. En este sentido, las pendientes mostradas por ambos equipos son prácticamente intercambiables ya que sus valores tienen una diferencia correspondiente al 4.37%, esto se considera aceptable ya que está por debajo del 5% de variación. Respecto a la ordenada al origen, se trata de un error sistemático que se puede solucionar restando este valor al dividir por la pendiente la absorbancia obtenida.

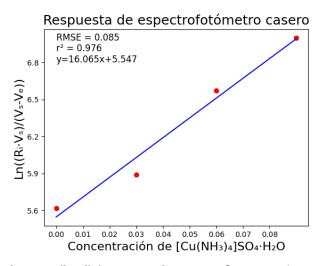


Figura 4. Respuesta del prototipo estudiantil de espectrofotometro: Se muestra la concentración de la sustancia de cobre en la que se calibró el prototipo estudiantil de espectrofotómetro y sus respectivos resultados obtenidos, junto con su error cuadrado medio (RMSE) y coeficiente de determinación (r²).

Comparación del prototipo estudiantil y espectrofotómetro comercial

De acuerdo con el análisis de regresión lineal se obtuvo una pendiente de 0.953 (Fig. 5). Así mismo se obtuvo un valor de la ordenada al origen de 5.531. Respecto al valor del coeficiente de correlación de Pearson se observó un resultado de 0.971. El error cuadrático medio (RMSE) arrojó un valor de 0.093. En este sentido, las pendientes mostradas por ambos equipos son prácticamente intercambiables ya que sus valores tienen una diferencia correspondiente al 4.37%, esto se considera aceptable ya que está por debajo del 5% de variación. Respecto a la ordenada al origen, se trata de un error sistemático que se puede solucionar restando este valor al dividir por la pendiente la absorbancia obtenida.

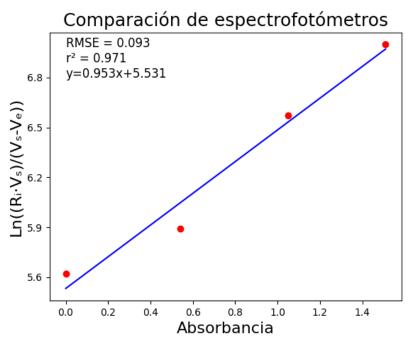


Figura 5. Desempeño del prototipo estudiantil de espectrofotometro frente al equipo comercial. Análisis de regresión entre la variable de respuesta del prototipo estudiantil de espectrofotómetro (Ln((Ri*Vs)/Vs-Ve)) frente a la absorbancia obtenida con el equipo comercial. Se muestra la ecuación de la recta correspondiente junto con su error cuadrado medio (RMSE) y el coeficiente de determinación (r²).

Conclusiones

La construcción de un prototipo de un prototipo estudiantil de espectrofotómetro ofrece una alternativa viable para adquirir instrumentación analítica a un bajo costo. Además de que la construcción de este tipo de dispositivos experimentales contribuye a eliminar el efecto de la caja negra asociada a los equipos comerciales, lo que favorece su valor didáctico en ambientes escolares. De acuerdo al análisis de regresión lineal empleado para construir las curvas de calibración con cada equipo, se demuestra que nuestro prototipo muestra un nivel de precisión aceptable. Por último, se puede concluir que la variable de respuesta del prototipo estudiantil de espectrofotómetro es directamente proporcional a la absorbancia medida con el espectrofotómetro comercial.

Referencias

- Angugo. (s. f.-a). GitHub angugo06/congreso_espectrofotometro: Desempeño de un prototipo estudiantil de espectrofotometro. GitHub.
 https://github.com/angugo06/congreso_espectrofotometro
- De Tecnología del Plástico, P. D. P. (2023, 29 junio). class="MsoNormal"Esectrofotómetro:
 ¿Qué es y para qué sirve?
- García, R. D. (2018). Instrumentos que revolucionaron la química: la historia del espectrofotómetro.
- Harris, D. C. (2003). Análisis químico cuantitativo. Argentina: Reverté.
- Imagen 1. Divisor de voltaje. (s. f.). La Electrónica. https://laelectronica.com.gt/extras/divisor-de-voltaje
- Ley_de_Beer-Lambert. (s. f.). https://www.quimica.es/enciclopedia/Ley_de_Beer-Lambert.html
- Ley de OHM. (2021, 1 marzo). Portal Académico del CCH.
- https://portalacademico.cch.unam.mx/cibernetica1/implementacion-de-circuitos-logicos/ley-de-ohm
- Manero, P. (2024, January 3). Análisis del coeficiente de correlación de Pearson: un enfoque completo en evaluación de relaciones Agen . . . Agencia de investigación, estudio e inteligencia de Mercados. https://blog.estudiocontar.com/2023/12/22/coeficiente-de-correlacion-de-pearson/#0-qu%C3%A9-es-el-coeficiente-de-correlaci%C3%B3n-de-pearson-
- Oracle® Fusion Cloud EPM Trabajo con Planning. (n.d.).
 https://docs.oracle.com/cloud/help/es/pbcs_common/PFUSU/insights_metrics_RMSE.htm#PFUSU-GUID-FD9381A1-81E1-4F6D-8EC4-82A6CE2A6E74
- Plástico.https://www.plastico.com/es/noticias/espectrofotometro-que-es-y-para-que-sirve
- Recta por Mínimos Cuadrados. (n.d.).
 http://prepa8.unam.mx/academia/colegios/matematicas/paginacolmate/applets/eyp/Applets_G
 eogebra/rectamincuad.html
- Tcm. (2023, December 19). ¿Qué es la curva de calibración y para qué sirve? TCM Consultoría
 Y Formación. https://www.tcmetrologia.com/blog/curva-calibracion/