

Manual de prácticas para Química Analítica Instrumental

"Enfoque Interdisciplinario para
Ciencias de la Tierra"

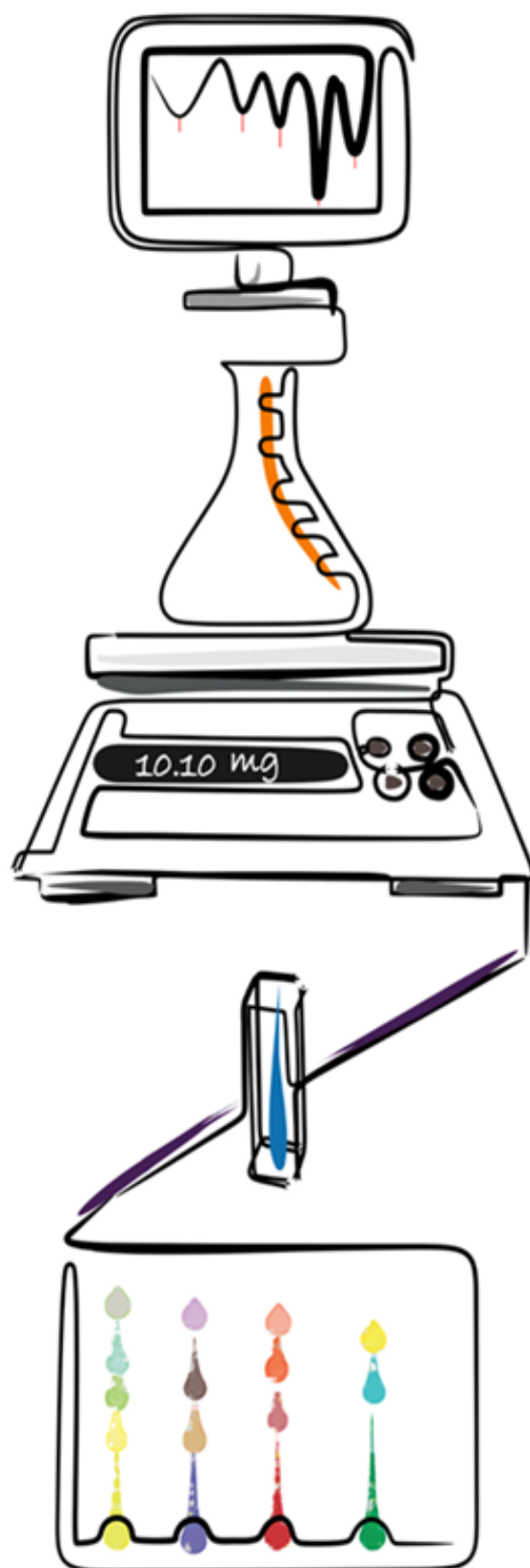
Dra. Adriana Leticia Meléndez López
Dra. Alicia Negrón Mendoza
QFB. Claudia Consuelo Camargo Raya
M. en E.M.S. Isabel Mejía Luna
Dr. Jorge Armando Cruz Castañeda

Programa de Apoyo a Proyectos para Innovar y
Mejorar la Educación PAPIME UNAM **PE209324**.

Dr. Jorge Armando Cruz Castañeda
COORDINADOR



ENCiT
ESCUELA NACIONAL de
CIENCIAS de la TIERRA



Diciembre 2025

Autores:

Dra. Adriana Leticia Meléndez López, ENCiT-UNAM

Dra. Alicia Negrón Mendoza, ICN-UNAM

QFB. Claudia Consuelo Camargo Raya, ICN-UNAM

M en E.M.S Isabel Mejía Luna, ENCiT-UNAM

Dr. Jorge Armando Cruz Castañeda, ICN-UNAM

Objetivo didáctico:

Desarrollar en el alumnado de la Licenciatura de Ciencias de la Tierra las competencias para seleccionar y aplicar algunas técnicas analíticas instrumentales, además de interpretar los resultados analíticos, fomentando un pensamiento crítico que vincule los fundamentos del análisis químico con la posible solución de problemáticas reales de las Ciencias de la Tierra, bajo los principios de seguridad, control de la calidad en la metrología y la responsabilidad ambiental.

Citar el documento como:

Meléndez López, A. L., Negrón Mendoza, A., Camargo Raya, C. C., Mejía Luna, I., y Cruz Castañeda, J. A. (2025). *Manual de prácticas para Química Analítica Instrumental: Enfoque Interdisciplinario para Ciencias de la Tierra*. Universidad Nacional Autónoma de México.

Licencia de derechos:

Manual de prácticas para Química Analítica Instrumental: Enfoque Interdisciplinario para Ciencias de la Tierra” © 2025 por Adriana Leticia Meléndez López, Alicia Negrón Mendoza, Claudia Consuelo Camargo Raya, Isabel Mejía Luna y Jorge Armando Cruz Castañeda, Universidad Nacional Autónoma de México, Avenida Universidad 3000, Ciudad Universitaria, Coyoacán, 04510, Ciudad de México. Esta obra está bajo una licencia Creative Commons Atribución/Reconocimiento-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional. Para ver una copia de esta licencia, visite <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

Este documento se realizó con apoyo del Programa de Apoyo a Proyectos para Innovar y Mejorar la Educación (PAPIME) de la UNAM con clave **PE209324**

Agradecimientos

Se agradece el apoyo financiero del Programa de Apoyo a Proyectos para Innovar y Mejorar la Educación (PAPIME) de la UNAM con clave **PE209324**, titulado “Material de apoyo para mejorar el proceso de enseñanza-aprendizaje en Química Analítica Instrumental para las Ciencias de la Tierra desde un perfil interdisciplinar”, y el apoyo institucional del Instituto de Ciencias Nucleares y la Escuela Nacional de Ciencias de la Tierra, ambas dependencias de la UNAM.

Agradecemos a todas las personas académicas, técnicas y alumnas que participaron en el desarrollo y validación de estas prácticas, cuyo esfuerzo colectivo ha hecho posible este manual. Así como a la LCT. María Fernanda García Hurtado y al Q. Juan Alberto Reyes Alcántara, por la colaboración en la elaboración de parte de los contenidos visuales utilizados en este manual.

Confiamos en que este material será de gran utilidad en la formación de las siguientes generaciones de profesionales en las Ciencias de la Tierra, capaces de emplear las herramientas del análisis químico instrumental en la comprensión y solución de problemas relacionados a sus respectivas áreas de desarrollo profesional.

Prólogo

Este manual está dirigido al alumnado de la Licenciatura de Ciencias de la Tierra, con la finalidad de que tenga las bases necesarias para realizar análisis con técnicas espectroscópicas UV-visible e infrarroja, y separativas como la cromatografía, contextualizadas en las Ciencias de la Tierra, siendo su primer encuentro con las técnicas básicas de análisis químico instrumental.

Esta propuesta nace de la necesidad de acotar la brecha entre la química analítica y su aplicación directa en el quehacer de las Ciencias de la Tierra al ofrecer un material con un perfil interdisciplinario, que conecte los fundamentos del análisis químico con las geociencias.

El manual está estructurado para que guíe al alumnado paso a paso, en la realización de cada experiencia de laboratorio, en donde se aborda el tema central y los posibles usos de las técnicas y equipamientos. Se inicia con la preparación de sus muestras, su tratamiento, y una guía de los resultados que se obtendrán.

Este compendio de experiencias de laboratorio abarca técnicas espectroscópicas y de separación ampliamente utilizadas en diversos aspectos de investigación, docencia y sector privado. Este manual presenta protocolos estandarizados, que han sido probados por el alumnado y docentes de la asignatura optativa “Química Analítica Instrumental”, que se imparte en la etapa avanzada de la Licenciatura en Ciencias de la Tierra en la Escuela Nacional de Ciencias de la Tierra. La creación de este material ha contado con el apoyo de los Laboratorios de Evolución Química (LEQ), los Laboratorios de Química de Plasmas y Estudios Planetarios (LQPyEP), ambos del Instituto de Ciencias Nucleares, así como del Laboratorio de Análisis de Contaminantes en Agua, Suelo y Aire (LACASA) de la ENCiT. Con estos materiales se pretende sumar a la formación de la comunidad egresada con herramientas analíticas que pueda emplear en sus actividades profesionales.

Es importante destacar que este material es resultado del proyecto DGAPA-PAPIME PE209324 "Material de apoyo para mejorar el proceso de enseñanza-aprendizaje en Química Analítica Instrumental para las Ciencias de la Tierra desde un perfil interdisciplinario", que refleja el compromiso de nuestra Universidad con la innovación educativa y la mejora continua de los procesos de enseñanza-aprendizaje.

Índice

Agradecimientos	2
Prólogo.....	3
Uso e importancia de una bitácora de laboratorio: Registro y fundamento del trabajo experimental.....	5
Importancia de un informe de resultados: Comunicación y análisis	6
Sistema Globalmente Armonizado (SGA): Clasificación y etiquetado de productos químicos.....	7
Tratamiento y eliminación de residuos	8
Práctica No. 1. Preparación de disoluciones: Principios básicos	10
Práctica No. 2. Análisis volumétrico: Valoración de una reacción de neutralización	15
Práctica No. 3. Cuantificación de un contaminante emergente (paracetamol) en agua por espectrofotometría UV-Vis	22
Práctica No. 4. Análisis multicomponente: Cuantificación de clorofila A y B en muestras de agua mediante espectrofotometría UV-Vis.....	27
Práctica No. 5. Espectroscopía infrarroja: Introducción a la técnica	33
Práctica No. 6. Identificación de grupos funcionales mediante espectroscopía infrarroja aplicada a una reacción de esterificación de Fischer	39
Práctica No. 7. Cromatografía en capa fina: Identificación de terpenos en flores de manzanilla	45
Práctica No. 8. Cromatografía de gases: Separación de hidrocarburos y caracterización de fracciones de petróleo	52
Evaluación de desempeño: Bitácora de laboratorio	58
Instrumento de evaluación: Bitácora de laboratorio	59
Evaluación de desempeño: Informe de resultados	60
Instrumento de evaluación: Informe de resultados.....	61
Bibliografía general	62
Créditos de elementos gráficos.....	64

Uso e importancia de una bitácora de laboratorio: Registro y fundamento del trabajo experimental

Una bitácora de laboratorio es un registro cronológico, permanente y personal de todas las actividades, observaciones y resultados relacionados con el trabajo experimental. Constituye el documento legal y científico que respalda el proceso de investigación y experimentación, sirviendo como evidencia del trabajo realizado y como base para la elaboración de informes formales.

Entre sus objetivos principales se encuentra el registro científico detallado de todos los procedimientos realizados, observaciones directas durante los experimentos, conservación de resultados crudos y datos originales, así como el mantenimiento de un historial completo del trabajo experimental.

Asimismo, garantiza la trazabilidad y transparencia al permitir la reproducción exacta de los experimentos, facilitar la detección y corrección de errores, proporcionar evidencia documental de los resultados y asegurar la integridad científica del trabajo.

Adicionalmente, contribuye al desarrollo de competencias profesionales al fomentar el pensamiento crítico y reflexivo, desarrollar habilidades de organización y sistematización, mejorar la comunicación científica escrita y cultivar hábitos de rigor y disciplina investigadora.

Entre los elementos esenciales que debe contener una bitácora se incluyen la información básica de cada sesión experimental (fecha, título y objetivos), el procedimiento experimental detallado (reactivos utilizados, materiales y equipos empleados), descripción paso a paso del procedimiento, modificaciones al protocolo original, el registro completo de datos (mediciones directas con sus unidades, observaciones cualitativas detalladas, cálculos realizados mostrando el procedimiento), el análisis e interpretación de resultados, dificultades encontradas y soluciones implementadas, conclusiones preliminares y reflexiones para futuras mejoras.

Importancia de un informe de resultados: Comunicación y análisis

Si la bitácora es el registro fundamental de qué se hizo en el laboratorio, el informe de resultados es el documento formal que comunica los hallazgos, las metodologías y las conclusiones de una investigación o una práctica experimental.

El trabajo experimental no termina al apagar el equipo o limpiar el material de vidrio utilizado. La comunicación de los hallazgos es una parte integral e indispensable del método científico. Un experimento cuyos resultados no se analizan y no se comunican de forma organizada es un experimento incompleto.

A diferencia de la bitácora, que es un registro cronológico y detallado de todo el proceso (incluyendo errores, datos crudos y observaciones en tiempo real), el informe es un documento analítico, estructurado y sintético. Su objetivo no es narrar el "minuto a minuto" de la práctica, sino presentar un argumento científico basado en la evidencia que se registró en una bitácora. Su elaboración exige rigor, precisión y objetividad, ya que no solo documenta lo realizado, sino que también permite la evaluación crítica del trabajo por parte de la comunidad académica y profesional.

En el ámbito profesional, especialmente en las Ciencias de la Tierra, los informes son herramientas fundamentales para la toma de decisiones. Un informe bien estructurado sobre la calidad de aguas subterráneas, la composición de minerales o la caracterización de suelos, por ejemplo, puede influir en políticas ambientales, proyectos de exploración o medidas de remediación. La capacidad de redactar informes claros, precisos y sintéticos es, por tanto, una habilidad indispensable para la comunidad egresada de la Licenciatura en Ciencias de la Tierra.

La estructura básica de un informe incluye: un resumen que sintetiza el trabajo completo; una introducción que contextualiza el problema; los objetivos que definen el alcance del estudio; una sección metodológica que describe los materiales, reactivos y procedimientos empleados; la presentación de resultados de manera organizada y clara, apoyada en tablas y figuras; un análisis y discusión donde se interpretan los resultados y se relacionan con el marco teórico; conclusiones que sintetizan los hallazgos principales y su relevancia; y finalmente las referencias bibliográficas citadas unificadas en un mismo formato.

Sistema Globalmente Armonizado (SGA): Clasificación y etiquetado de productos químicos

La seguridad comienza antes de entrar al laboratorio y antes de manipular cualquier reactivo químico. Comienza con la correcta identificación de los riesgos y peligros asociados con el uso de sustancias químicas. Durante décadas, existieron múltiples sistemas nacionales y regionales para clasificar estos peligros, lo que generaba confusión y riesgo. Para atender esta problemática, en el año 2002, las Naciones Unidas y otras organizaciones internacionales implementaron un sistema unificado para la clasificación y etiquetado de productos químicos armonizado a nivel mundial, denominado Sistema Globalmente Armonizado (SGA). Este sistema busca compartir información estandarizada sobre los peligros y efectos que pueden generarse por el uso de productos químicos, con el fin de proteger y salvaguardar la salud humana y el medio ambiente.

El principal objetivo del SGA es establecer una base de datos para la clasificación y gestión de compuestos químicos, además de proporcionar información relevante para las personas transportadoras, consumidoras, trabajadoras, socorristas y para la protección del medio ambiente. Por ello, el SGA incluye criterios de clasificación armonizados para las sustancias químicas puras y sus mezclas comerciales, señalando claramente los peligros físicos, a la salud y al medio ambiente, a través de las etiquetas y las hojas de seguridad.

El SGA establece 9 pictogramas estandarizados que representan los diferentes tipos de peligro:



México, a través de la Norma Oficial Mexicana NOM-018-STPS-2015, ha implementado y regulado el uso de las etiquetas y hojas de seguridad SGA desde el 2015. El presente manual de laboratorio fomenta en el alumnado el uso y los conocimientos de los pictogramas en las etiquetas y hojas de seguridad (SGA), como una competencia fundamental para su desempeño profesional seguro en las Ciencias de la Tierra.

Como estudiante, es tu obligación y responsabilidad leer y comprender la etiqueta de cada reactivo antes de utilizarlo. El SGA te proporciona la información necesaria de forma rápida y visual. Nunca debes manipular una sustancia sin antes haber identificado sus pictogramas.

Tratamiento y eliminación de residuos

Conscientes del posible daño ambiental de los compuestos químicos utilizados en las prácticas, este manual promueve protocolos experimentales apegados a los principios de la química verde, utilizando cantidades mínimas de reactivos y generando la menor cantidad de residuos posible. Todos los residuos generados deben eliminarse de acuerdo con los procedimientos implementados en el Instituto de Ciencias Nucleares y la Escuela Nacional de Ciencias de la Tierra de la UNAM, alineados con la normativa ambiental mexicana aplicable.

1. Clasificación de residuos.

Residuos sólidos:

- No peligrosos: Material de vidrio roto, guantes no contaminados, papel filtro limpio, sanitas.
- Peligrosos: Sólidos contaminados con reactivos químicos.

Residuos Líquidos:

- Disoluciones acuosas: salinas, amortiguadoras, de neutralización.
- Disoluciones orgánicas: Disolventes halogenados y no halogenados, mezclas de extracción.

2. Manejo de residuos:

- Separar los residuos según su composición y peligrosidad.
- Utilizar contenedores adecuados para cada tipo de residuo.
- Etiquetar claramente todos los recipientes de residuos.

Tratamiento *in situ*:

- Neutralización de ácidos y bases.
- Precipitación de metales pesados.

3. Prevención y minimización:

- Diseñar experimentos a microescala cuando sea posible.
- Utilizar la cantidad mínima necesaria de reactivos.

4. Protocolo de manejo de residuos durante una práctica

Antes de la práctica:

- Identificar los residuos que se generarán.
- Preparar contenedores adecuados.
- Revisar las hojas de seguridad de los reactivos.

Durante la práctica:

- Recolectar los residuos en los contenedores designados.
- Mantener la segregación de residuos incompatibles.
- Registrar en bitácora los residuos generados.

Al Finalizar la Práctica:

- Cerrar bien y etiquetar los contenedores.
Composición de los residuos, concentración aproximada, disolvente utilizado, fecha y nombre de la persona que generó el residuo.
- Almacenar temporalmente en área designada.

Un manejo adecuado de residuos no solo protege el medio ambiente, sino que también representa una competencia profesional esencial en el ejercicio actual de las Ciencias de la Tierra.

Práctica No. 1. Preparación de disoluciones: Principios básicos

Resumen

Un gran número de las reacciones químicas se llevan a cabo en disolución. Por ello, es necesario desarrollar habilidades y practicar el procedimiento experimental adecuado para la correcta preparación de disoluciones. En esta práctica, el alumnado se introducirá en el correcto empleo de material volumétrico y la balanza analítica para la elaboración de disoluciones químicas, preparando disoluciones acuosas de ácidos y bases comunes.

1. Introducción

Una disolución es una mezcla homogénea conformada por diferentes sustancias en cualquier estado de agregación. Los componentes de esta mezcla se denominan soluto y disolvente. En la preparación de una disolución es necesario considerar el material adecuado, por ejemplo: material volumétrico (matraces aforados, pipetas volumétricas, etc.), balanza analítica, y reactivos con pureza conocida (Figura 1). La correcta preparación de disoluciones estándar permite que el análisis químico cuantitativo sea más preciso y exacto, mejorando los límites de detección y cuantificación. Estos últimos parámetros son fundamentales en el análisis químico instrumental.



Figura 1. Material necesario para preparar disoluciones.

2. Aplicación en las Ciencias de la Tierra

La habilidad de preparar disoluciones con precisión va más allá de un requisito de laboratorio, es una competencia profesional directa en las Ciencias de la Tierra.

Esta precisión es crítica por ejemplo para:

- **Análisis hidrogeoquímico:** La preparación correcta de disoluciones estándar de referencia (ejemplo, para metales pesados, nitratos o fosfatos) es la base para calibrar algunos instrumentos, que se utilizan para monitorear la calidad del agua en acuíferos y cuerpos superficiales.
- **Edafología (ciencia del suelo):** La preparación de disoluciones amortiguadoras a un valor de acidez dado (pH específico) es indispensable para la extracción y cuantificación de nutrientes o contaminantes en muestras de suelo, ya que la solubilidad de estas especies depende del valor de pH.
- **Geología mineralogía:** La preparación de disoluciones de digestión ácida de concentración conocida es necesaria para digerir muestras geológicas (rocas o minerales) y luego analizar su composición elemental mediante técnicas como la espectroscopía de absorción atómica (AAS).

3. Competencias promovidas en el alumnado

Capacidad de realizar mediciones fiables y exactas, asegurando la trazabilidad de los datos según las buenas prácticas de laboratorio.

4. Actividades previas a la sesión experimental

Investigar:

1. ¿Cuáles son los diferentes grados y nomenclatura de la pureza de los reactivos químicos comerciales que se utilizarán en esta experiencia?
2. ¿Cuáles son las unidades de concentración de una disolución?
3. ¿Cuáles son los aspectos generales para el correcto uso de la balanza analítica, pipetas y matraces volumétricos?
4. ¿Cuáles son las precauciones generales que se deben considerar al disolver un ácido o una base fuerte con agua?
5. ¿Qué tipo de recipientes son más adecuados para almacenar las disoluciones preparadas, en particular si son disoluciones básicas?
6. Calcular las cantidades de reactivos necesarias para preparar las distintas disoluciones.
7. Adjuntar en la bitácora las etiquetas SGA de todos los reactivos a utilizar.

5. Objetivo general

Desarrollar la capacidad metrológica del alumnado mediante el empleo riguroso de la balanza analítica y material volumétrico, asegurando la trazabilidad y exactitud en la preparación de disoluciones.

6. Objetivos particulares

- Explicar la influencia de la pureza de los reactivos en el cálculo de concentraciones estándar.
- Ejecutar la preparación de disoluciones con exactitud metrológica.
- Diferenciar concentraciones teóricas vs. experimentales por tolerancias del material volumétrico y la balanza analítica.

7. Materiales y reactivos

Para el procedimiento experimental se requieren los materiales y reactivos que se listan en la Tabla 1.

Tabla 1. Materiales y reactivos.

Reactivos	Material
Ácido clorhídrico (HCl)	5 matraces aforados de 100 mL
Ácido sulfúrico (H ₂ SO ₄)	5 vasos de precipitados de 100 mL
Ácido acético (CH ₃ COOH)	pipetas volumétricas (diferentes volúmenes)
Hidróxido de potasio (KOH)	pisetas, propipetas, navecilla o papel para pesar y espátula
Hidróxido de sodio (NaOH)	balanza analítica
Agua desionizada (H ₂ O)	5 frascos limpios con tapa de 500 mL de capacidad
	marcador permanente y cinta para rotular

8. Procedimiento experimental

Preparar 100 mL de las siguientes disoluciones:

1. Ácido clorhídrico acuoso 0.01 mol L⁻¹
2. Ácido sulfúrico acuoso 0.01 mol L⁻¹
3. Ácido acético acuoso 0.01 mol L⁻¹
4. Hidróxido de potasio acuoso 0.01 mol L⁻¹
5. Hidróxido de sodio acuoso 0.01 mol L⁻¹

Procedimiento general

1. Preparar 100 mL de una de las disoluciones asignadas, colocar la información necesaria en la Tabla 2.
2. Etiquetar el matraz aforado y los frascos en los que se almacenarán las disoluciones. Mostrando la siguiente información:

Compuesto y concentración de la disolución
Fecha de preparación
Persona o equipo responsable

Nota: Respalidar estos datos en la bitácora

A. Reactivos sólidos (KOH y NaOH)

3A. Pesar los reactivos y traspasarlos al matraz aforado. Disolver el reactivo con 25 mL de agua destilada.

4A. En caso de usar navecilla, enjuagar con agua varias veces con ayuda de una piseta, siempre por debajo de la marca de aforo del matraz.

5A. Disolver por completo el soluto antes de llegar a la línea de aforo del matraz.

B. Reactivos líquidos (HCl, H_2SO_4 , CH_3COOH)

3B. Para el cálculo de la cantidad del ácido, considerar la pureza de los reactivos, y como en el caso de los ácidos minerales, su densidad y transformar la masa obtenida en volumen.

4B. Medir el volumen de reactivo necesario con una pipeta volumétrica.

Nota: No tomar el reactivo directamente del recipiente que lo contiene, ni succionar el líquido con la boca.

5B. Disolver el reactivo con 25 mL de agua destilada y homogenizar.

Nota: Recordar las precauciones a considerar cuando se mezcla un ácido con agua. (siempre se agrega el ácido al agua y nunca al revés)

6B. Disolver por completo el soluto sin llegar a la línea de aforo del matraz.

Finalización

6. Agregar agua al matraz hasta llegar a línea de aforo (Figura 2).

7. Trasvasar las disoluciones preparadas en los frascos limpios y etiquetados.

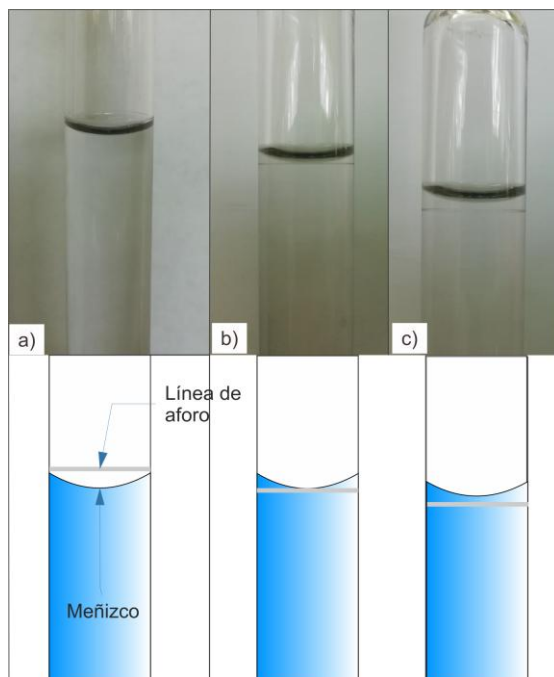


Figura 2. a) líquido por debajo de la línea de aforo; b) líquido que correctamente se encuentra en la línea de aforo; c) líquido por encima de la línea de aforo.

La precisión de la concentración real de las disoluciones que prepares en esta práctica (Práctica 1) intervendrá directamente la validez de los resultados que obtengas en la práctica de valoración (Práctica 2).

9. Resultados y observaciones

Tabla 2. Disoluciones para preparar.

Equipo	Disolución	Cantidad de soluto teórico ¹ (g o mL)	Cantidad de soluto experimental ¹ (g o mL)	Concentración no valorada (mol/L)
1	HCl			
2	H ₂ SO ₄			
3	CH ₃ COOH			
4	NaOH			
5	KOH			

¹Soluto teórico es el resultado del cálculo y soluto experimental es la cantidad medida en la balanza o pipeta.

10. Actividades posteriores a la sesión experimental

- Elaborar un mapa mental referente a la preparación de disoluciones, resaltando los aspectos más importantes a considerar para su correcta elaboración.
- Adaptar el método experimental utilizado en esta práctica y redactar el método adecuado para preparar las siguientes disoluciones, incluyendo cálculos, unidades y medias de seguridad:
 - 500 mL de disolución 0.01 mol L⁻¹ de KOH, partiendo de KOH comercial del 96 % de pureza.
 - 25 mL de disolución 0.5 mol L⁻¹ de Cu(NO₃)₂, partiendo del Cu(NO₃)₂•3H₂O comercial al 99 % de pureza.
 - 0.1 L de disolución de HNO₃ al 0.001 mol L⁻¹ a partir de la comercial (86 % en v/v, densidad de 1.51 g/mL).
- Investigar cómo se elabora una valoración volumétrica (titulación).

Referencias

- Ayres, G. H. (1970). Análisis químico cuantitativo (2.^a ed.). Harla.
- Chang, R. (2010). Química (10.^a ed.). McGraw-Hill/Interamericana Editores.
- Harris, D. C. (2001). Análisis químico cuantitativo (2.^a ed.). Editorial Reverté.
- Vogel, A. I. (1989). Quantitative chemical analysis (5.^a ed.). Longman Scientific y Technical.

Práctica No. 2. Análisis volumétrico: Valoración de una reacción de neutralización

Resumen

Una de las herramientas básicas en el análisis químico cuantitativo es una valoración. En esta práctica, el alumnado se introducirá en el manejo y empleo de la técnica de valoración volumétrica para la determinación de concentraciones a través de disoluciones estándar. Se determinará la concentración real de las disoluciones preparadas en la práctica anterior mediante una valoración ácido-base, utilizando diferentes indicadores y comparando los resultados obtenidos con sistemas de titulación convencional y microtitulación.

1. Introducción

Una valoración o titulación es un análisis volumétrico, ampliamente utilizado para validar la concentración real de una disolución problema, partiendo de una disolución con concentración determinada. El proceso experimental consta de agregar poco a poco, con una bureta, una disolución de concentración conocida (disolución estándar), a una disolución problema. Este proceso finaliza cuando se ha agregado la cantidad necesaria para obtener un punto de equivalencia, es decir cuando se llega a la neutralización de la disolución, el cual puede ser determinado por un cambio de color de un indicador visual. Los indicadores son compuestos orgánicos en disolución que cambian de color en función del pH (Figura 1).

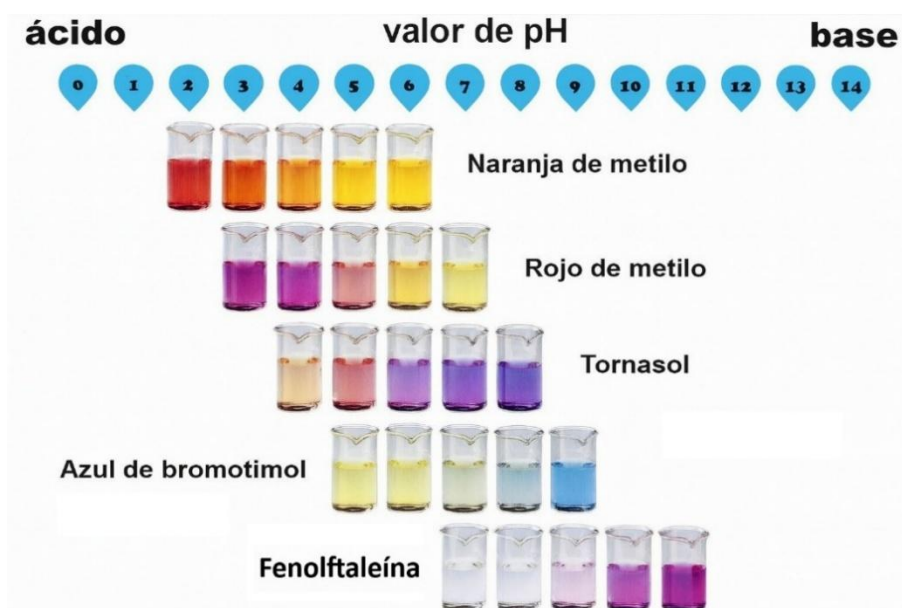


Figura 1. Coloración de los indicadores más comunes en función del pH.

El punto de equivalencia se calcula usando la ecuación general de valoración, que toma en cuenta la estequiometría de la reacción:

$$n_a M_a V_a = n_b M_b V_b$$

En donde:

- $M_a V_a$ son la molaridad y el volumen del ácido.
- $M_b V_b$ son la molaridad y el volumen de la base.
- n_a es el número de iones H^+ que el ácido dona (ej. 1 para HCl, 2 para H_2SO_4).
- n_b es el número de iones OH^- que la base dona (ej. 1 para NaOH, 1 para KOH).

2. Aplicación en las Ciencias de la Tierra

La valoración ácido-base no es solo una técnica clásica de laboratorio; es uno de los métodos más robustos y asequibles para los análisis rutinarios en el campo de las Ciencias de la Tierra como la calidad del agua y el análisis de suelos.

Por ejemplo:

- Determinación de alcalinidad: La aplicación más directa de esta práctica es la medición de la alcalinidad en aguas naturales (ríos, lagos, acuíferos). La alcalinidad (principalmente por carbonatos) es la capacidad del agua para neutralizar ácidos, un parámetro importante para entender la química del agua y su capacidad de amortiguamiento.
- Determinación de acidez: De forma inversa, la acidez en el agua (causada por CO_2 disuelto, ácidos minerales o descargas industriales) se determina titulando la muestra con una base fuerte como el NaOH estandarizado. Este análisis es crucial para monitorear el impacto de la lluvia ácida y la contaminación en ecosistemas acuáticos.
- Análisis de suelos: La valoración ácido-base es una herramienta de diagnóstico fundamental en la agricultura y la edafología. La salud del suelo depende críticamente de su valor de pH, ya que este controla la disponibilidad de nutrientes para las plantas y la toxicidad de metales como el aluminio.

A pesar de que esta práctica se enfoca en la estandarización de disoluciones, la habilidad que se desarrolla (ej. el manejo de la bureta, la identificación precisa del punto final y los cálculos estequiométricos) es precisamente la misma que se requiere y aplica en algunos análisis ambientales. Esta metodología además de proporcionar resultados confiables es fácil de realizar, asequible y ampliamente utilizada en diferentes ámbitos.

3. Actividades previas a la sesión experimental

Investigar:

1. ¿Cuál es la función de un indicador visual en una valoración?
2. ¿Cuál es el intervalo de pH en cual la fenolftaleína, el azul de bromotimol y el naranja de metilo viran?

3. ¿Qué es un punto de equivalencia en una valoración?
4. ¿Cuáles son los productos de una reacción de neutralización?
5. ¿Qué otros tipos de valoraciones existen?
6. ¿Cuáles son los alcances y limitaciones del análisis volumétrico?
7. Adjuntar en la bitácora las etiquetas SGA (Sistema Globalmente Armonizado) de todos los reactivos a utilizar en la sesión experimental.
8. Material audiovisual de apoyo:

Para comprender mejor la técnica de valoración, se recomienda visualizar los siguientes videos tutoriales de Meléndez López (2021a, 2021b):

- Titulación ácido-base: <https://youtu.be/Zn8y-TC8py0?si=avW8cJG07456yWAQ>
- Titulación potenciométrica: https://youtu.be/JnWg8Rpu_mY

4. Competencias promovidas en el alumnado

Evaluación crítica del error y la incertidumbre en mediciones cuantitativas.

5. Objetivo general

Validar la concentración de disoluciones estándar a través de valoraciones ácido-base, evaluando críticamente el error experimental y comparando la eficiencia de los métodos de titulación convencional y microescala.

6. Objetivos particulares

- Interpretar el punto de equivalencia mediante el uso de indicadores visuales.
- Ejecutar titulaciones de neutralización para estandarizar reactivos.
- Comparar la eficiencia y minimización de residuos entre sistemas convencionales y microescala.

7. Materiales y reactivos

Para el procedimiento experimental se requieren los materiales y reactivos que se listan en la Tabla 1.

Tabla 1. Materiales y reactivos.

Reactivos	Material
Disolución estándar de HCl 0.01 mol L ⁻¹	1 matraz Erlenmeyer de 50 mL
Disolución estándar de NaOH 0.01 mol L ⁻¹	1 pipeta volumétrica de 5 mL
Disolución de fenolftaleína	1 bureta de 25 mL
Disolución de azul de bromotimol	soporte universal y pinzas de tres dedos
Disolución de naranja de metilo	parrilla de agitación y cuerpo magnético de agitación
	sistema de microtitulación

8. Procedimiento experimental

1. Determinar mediante un análisis volumétrico, la concentración real de las disoluciones elaboradas en la práctica 1:
 - a. Ácido clorhídrico acuoso 0.01 mol L^{-1}
 - b. Ácido sulfúrico acuoso 0.01 mol L^{-1}
 - c. Ácido acético acuoso 0.01 mol L^{-1}
 - d. Hidróxido de potasio acuoso 0.01 mol L^{-1}
 - e. Hidróxido de sodio acuoso 0.01 mol L^{-1}
2. Comparar los resultados obtenidos utilizando un sistema convencional y sistema de microtitulación.

Valoración convencional

1. Colocar 5 mL de la disolución problema en un matraz Erlenmeyer de 50 mL y agregar 1 gota del respectivo indicador.
2. Adicionar 10 mL de disolución estándar en una bureta de 25 mL.
3. Montar un dispositivo como el que se muestra en la Figura 2.
4. Adicionar gota a gota el estándar a la disolución problema hasta encontrar el punto de equivalencia.
5. Realizar la valoración por triplicado.

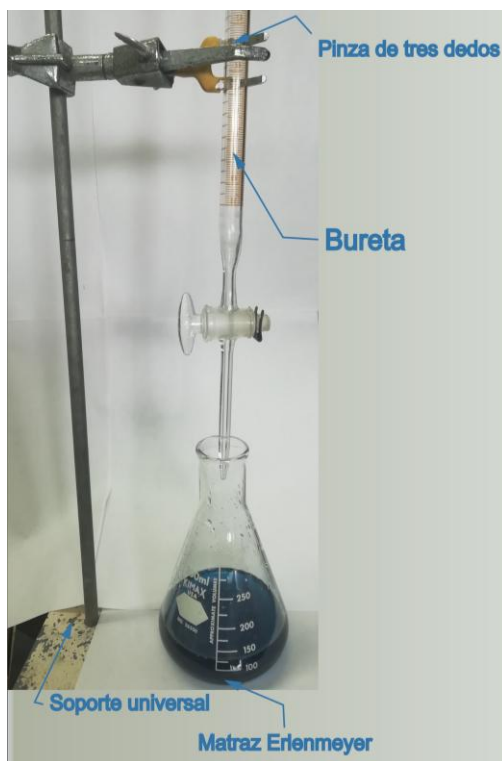


Figura 2. Dispositivo necesario para realizar una valoración.

Valoración a microescala

6. Repetir el procedimiento descrito anteriormente adaptado a microescala (1:10)
Figura 3.

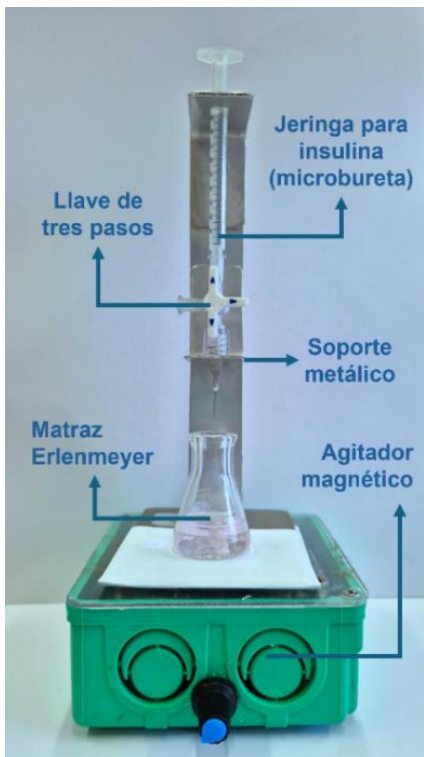


Figura 3. Sistema de microtitulación.

9. Resultados y observaciones

1. Calcular la concentración promedio de las disoluciones que se prepararon en la práctica 1, a partir de los resultados obtenidos de las tres valoraciones.
2. Calcular el error porcentual de la disolución problema.
3. Comparar los resultados obtenidos de ambos sistemas de valoración.
4. Analizar las posibles fuentes de error en cada método de valoración.
5. Discutir la precisión y exactitud de los resultados obtenidos.

Tabla 1. Resultados de valoración convencional.

Disolución problema	Volumen utilizado (mL)	Indicador	Volumen estándar gastado (mL)	Concentración determinada (mol L ⁻¹)
HCl	5.00			
H ₂ SO ₄	5.00			
CH ₃ COOH	5.00			
KOH	5.00			
NaOH	5.00			

Tabla 2. Resultados de valoración a microescala.

Disolución problema	Volumen utilizado (mL)	Indicador	Volumen estándar gastado (mL)	Concentración determinada (mol L ⁻¹)
HCl	0.50			
H ₂ SO ₄	0.50			
CH ₃ COOH	0.50			
KOH	0.50			
NaOH	0.50			

Tabla 3. Comparación de resultados.

Disolución problema	Concentración preparada (mol L ⁻¹)	Concentración determinada convencional (mol L ⁻¹)	Concentración determinada microescala (mol L ⁻¹)	Error porcentual convencional (%)	Error porcentual microescala (%)
HCl	0.01				
H ₂ SO ₄	0.01				
CH ₃ COOH	0.01				
KOH	0.01				
NaOH	0.01				

10. Actividades posteriores a la sesión experimental

1. Indicar las reacciones ácido-base balanceadas que se llevaron a cabo en el experimento.
2. Elaborar un mapa mental que relacione los conceptos involucrados en los experimentos.
3. Si se sustituye el indicador por un potenciómetro. ¿Cuáles son las principales diferencias en el análisis y en los resultados obtenidos?
4. Investigar aplicaciones de las valoraciones ácido-base en el campo de las Ciencias de la Tierra.

Referencias

1. Ayres, G. H. (1970). Análisis químico cuantitativo (2.^a ed.). Harla.
2. Chang, R. (2010). Química. McGraw-Hill/Interamericana Editores.
3. Harris, D. C. (2001). Análisis químico cuantitativo. Editorial Reverté.
4. Meléndez López, A. L. [Adriana L. Meléndez López]. (19 de abril de 2021a). *Titulación ácido – base: determinación de ácido cítrico en limón y ácido acético en vinagre*. [Video]. YouTube. <https://youtu.be/Zn8y-TC8py0?si=avW8cJG07456yWAQ>
5. Meléndez López, A. L. [Adriana L. Meléndez López]. (4 de mayo de 2021b). *Titulación potenciométrica: determinación de la concentración de ácido acético en vinagre*. [Video]. YouTube. https://youtu.be/JnWg8Rpu_mY
6. Skoog, D. A., y West, D. M. (1986). Introducción a la química analítica. Editorial Reverté.
7. Vogel, A. I. (1989). Quantitative chemical analysis. Longman Scientific y Technical.

Práctica No. 3. Cuantificación de un contaminante emergente (paracetamol) en agua por espectrofotometría UV-Vis

Resumen

Se ha comprobado que la espectrofotometría UV-Vis es una técnica analítica cuantitativa mediante la ley de Beer-Lambert, siempre y cuando la metodología del análisis sea óptima. En esta práctica, el alumnado planteará una metodología ante un problema analítico cuantitativo y procesará de manera eficiente los resultados que permiten cuantificar un contaminante emergente (paracetamol) mediante una curva de calibración.

1. Introducción

Una curva de calibración es un método gráfico ampliamente empleado en el análisis químico cuantitativo. Se basa en el modelo de la línea recta ($y = mx + b$) que mejor se ajusta a una serie de datos experimentales dentro de un intervalo determinado, donde la concentración del analito es la variable independiente, y la respuesta instrumental es la variable dependiente.

En general para la elaboración experimental de una curva de calibración se estima la relación de alguna propiedad del analito, con estándares de concentración conocida Figura 1.

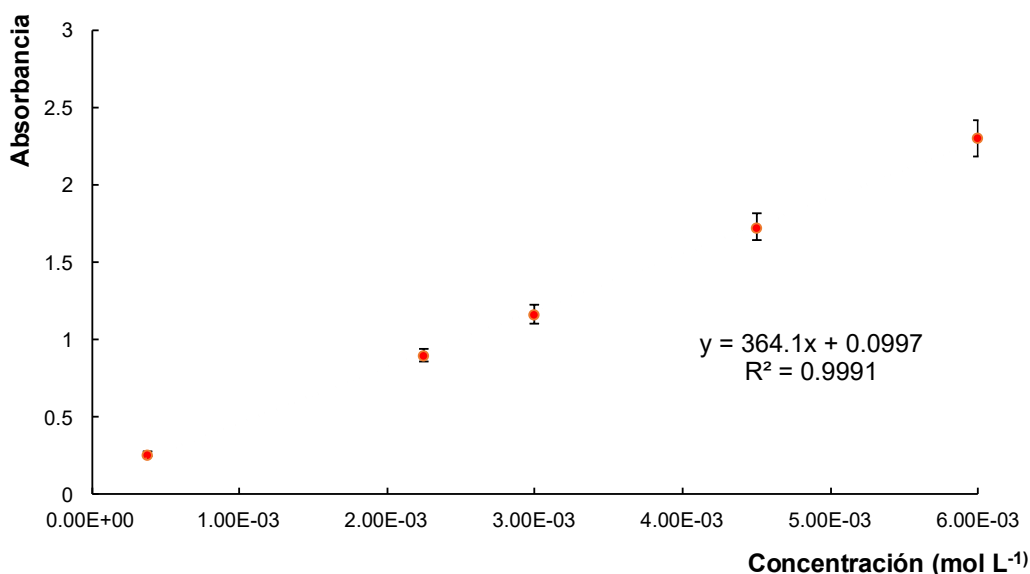


Figura 1. Curva de calibración de adenina.

La ley de Lambert-Beer ($A=\epsilon bC$) explica la relación matemática que existe entre la transmisión de luz a través de una sustancia, su concentración y el paso óptico del cuerpo que la luz atraviesa.

Sustituyendo los valores obtenidos de recta en la curva de calibración ($y = mx + b$), por las variables presentes en la de Lambert-Beer ($A= \epsilon bC$), se puede obtener el coeficiente de extinción molar (ϵ) y el paso óptico (b) a través de la pendiente, de la relación la absorbancia (A) y la concentración del analito (C). Con este parámetro, posteriormente se obtiene la concentración de muestras problemas. El valor de ϵ es característico de una sustancia a una longitud de onda dada.

El paracetamol (acetaminofén) es uno de los analgésicos y antipiréticos más consumidos en el mundo. Químicamente, su estructura (N-(4-hidroxifenil) acetamida) posee un anillo aromático que absorbe la luz ultravioleta, con un máximo de absorción ($\lambda_{\max}$) alrededor de 243 nm, lo que permite su fácil cuantificación mediante la ley de Lambert-Beer. Si bien es conocido por su uso farmacéutico, su consumo masivo y su baja metabolización en el cuerpo humano provocan que sea excretado y llegue a los sistemas de aguas residuales. Las plantas de tratamiento de agua residuales (PTAR) convencionales no están diseñadas para eliminarlo eficazmente, convirtiéndolo en un contaminante emergente.

2. Aplicación en las Ciencias de la Tierra

Esta práctica es una introducción directa al campo de la química ambiental. El término “contaminantes emergentes” se refiere a sustancias químicas que no han sido reguladas históricamente pero que, debido a su detección frecuente en el ambiente, generan preocupación sobre sus impactos ambientales y a la salud.

Una persona profesional de las Ciencias de la Tierra puede utilizar técnicas como la espectroscopía UV-Vis para:

- Monitorear la calidad de cuerpos de agua, ya sean superficiales o subterráneos.
- Monitorear la dispersión de contaminantes desde fuentes urbanas (plantas de tratamiento) hacia el ambiente.
- Evaluar la atenuación natural o la eficacia de las técnicas de remediación en la eliminación de estos compuestos.

Aunque en esta práctica se usa una concentración detectable por UV-Vis, en muestras reales, esta misma técnica se acopla a otros instrumentos para medir concentraciones mucho más bajas hasta las partes por billón.

3. Actividades previas a la sesión experimental

Investigar:

1. Investigar qué son los contaminantes emergentes y por qué el paracetamol se considera uno de ellos.
2. ¿Cuáles son los contaminantes emergentes más comunes?

- ¿Qué criterios se deben considerar para elegir un disolvente apropiado para extraer el principio activo del fármaco?
- ¿A qué se refieren los conceptos de linealidad, sensibilidad, límite de detección y cuantificación e intervalo de confianza?
- ¿Qué parámetros estadísticos deben ser considerados en una curva de calibración?
- ¿Qué es una curva de calibración con adiciones estándar?
- Adjuntar en la bitácora las etiquetas SGA de todos los reactivos a utilizar.

4. Competencias promovidas en el alumnado

Capacidad de elegir y validar métodos de análisis respecto a los objetivos de la investigación.

5. Objetivo general

Construir modelos de cuantificación analítica mediante una metodología ante un problema analítico cuantitativo y procesar de manera eficiente los resultados que permiten cuantificar el principio activo de un fármaco comercial como ejemplo de un contaminante emergente (paracetamol) mediante una curva de calibración.

6. Objetivos particulares

- Describir los criterios de selección de disolventes para la extracción de analitos.
- Construir una curva de calibración espectrofotométrica utilizando estándares de referencia.
- Analizar la linealidad y límites de detección del modelo para análisis de trazas.

7. Materiales y reactivos

Para el procedimiento experimental se requieren los materiales y reactivos que se listan en la Tabla 1.

Tabla 1. Materiales y reactivos.

Reactivos	Material
acetaminofén ($C_9H_{11}NO_2$)	1 matraz aforado de 100 mL 7 matraces aforados de 10 mL
agua desionizada	pipetas volumétricas de diferentes volúmenes
paracetamol de 500 mg (3 distintas marcas comerciales)	piseta, espátula, naves para pesar y pañuelos desechables
	balanza analítica
	espectrofotómetro UV-Vis celdas de cuarzo (1 cm)
	Baño de ultrasonido

Procedimiento general:

- Elaborar una curva de calibración de acetaminofén (paracetamol) mediante espectrofotometría UV-Vis en un intervalo de 1×10^{-6} a 1.2×10^{-4} mol L⁻¹.
- Determinar el coeficiente de extinción molar del acetaminofén.
- Extraer el principio activo de acetaminofén de tres fármacos comerciales.
- Cuantificar el acetaminofén extraído de los tres fármacos comerciales.

8. Procedimiento experimental

1. Encender el espectrofotómetro de UV-Vis (mínimo 30 min. antes de comenzar el análisis).
2. Preparar 100 mL de una disolución estándar de acetaminofén (1.2×10^{-4} mol L⁻¹) y determinar la longitud máxima de absorción.
3. Elaborar una curva de calibración a la longitud de onda seleccionada previamente, con las siguientes diluciones:
 - 1.2×10^{-4} mol L⁻¹
 - 9×10^{-5} mol L⁻¹
 - 8×10^{-5} mol L⁻¹
 - 6×10^{-5} mol L⁻¹
 - 4×10^{-5} mol L⁻¹
 - 2.5×10^{-5} mol L⁻¹
 - 1.5×10^{-6} mol L⁻¹
 - 1×10^{-6} mol L⁻¹

9. Resultados y observaciones**Tabla 2. Curva de calibración de acetaminofén.**

Concentración (mol L ⁻¹)	Absorbancia
1.2×10^{-4}	
9×10^{-5}	
8×10^{-5}	
6×10^{-5}	
4×10^{-5}	
2.5×10^{-5}	
1.5×10^{-6}	
1×10^{-6}	

1. De la curva de calibración obtenida (Tabla 2), determinar: la ecuación de la recta, el coeficiente de correlación lineal y el coeficiente de extinción molar.
2. Con los resultados obtenidos, determinar la concentración del principio activo por pastilla y completar la Tabla 3.

Tabla 3. Resultados de la cuantificación del principio activo del paracetamol en 3 marcas comerciales, mediante espectrofotometría UV-Vis.

Marca del fármaco	Peso de pastilla (g)	Contenido del principio activo reportado (μg)	Contenido del principio activo determinado (μg)	Diferencia porcentual
1				
2				
3				

De los resultados obtenidos:

1. Analizar la linealidad del método analítico en el intervalo de trabajo.
2. Estimar los límites de detección (LOD) y de cuantificación (LOQ) del método.
3. Discutir la precisión y exactitud de los resultados obtenidos.

10. Actividades posteriores a la sesión experimental

1. Investigar y describir los diferentes métodos de extracción de analitos.
2. Elaborar un diagrama de flujo del procedimiento completo de cuantificación.
3. Investigar aplicaciones de la espectrofotometría UV-Vis en el análisis ambiental.
4. Discutir las ventajas y limitaciones del método espectrofotométrico para el monitoreo y control de algunos fármacos como el paracetamol en cuerpos de agua.
5. ¿Qué otros fármacos son contaminantes comunes del agua en México?
6. Discutir la diferencia entre la concentración de paracetamol que preparaste en el laboratorio (mg/L) y las concentraciones que se reportan comúnmente en aguas residuales (ng/L a $\mu\text{g/L}$). ¿Podrías medir una muestra real de un río con este método? ¿Por qué sí o por qué no?

Referencias

1. Harris, D. C. (2003). Análisis químico cuantitativo (3.^a ed.). Editorial Reverté.
2. Harvey, D. (2000). Modern analytical chemistry. McGraw-Hill.
3. Secretaría de Salud. (2004). Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos (8.^a ed.).
4. Skoog, D. A., Holler, F. J., y Crouch, S. R. (2008). Principios de análisis instrumental. Cengage Learning.

Práctica No. 4. Análisis multicomponente: Cuantificación de clorofila A y B en muestras de agua mediante espectrofotometría UV-Vis

Resumen

La separación de analitos en mezclas complejas en ocasiones resulta en casi imposible de hacer por los métodos clásicos separativos; por ello, la espectrofotometría UV-Vis ha sido ampliamente usada para realizar análisis multicomponente en matrices complejas. El análisis de mezclas en espectroscopía requiere métodos que permitan cuantificar cada analito, incluso cuando sus espectros de absorción se superponen. En esta práctica, se aplicará el método de análisis multicomponente (uso de ecuaciones simultáneas) para determinar la concentración de clorofila A y B en una mezcla, modelando una muestra ambiental contaminada.

1. Introducción

El coeficiente de extinción molar (ϵ) es una característica propia de cada especie química y su valor depende netamente de la estructura química. Este coeficiente muestra la relación lineal entre la concentración molar de una especie química y la cantidad de energía que absorbe un componente a una longitud de onda particular. Por lo tanto, la ecuación final que define a la ecuación de Lambert-Beer se escribe de la siguiente manera:

$$A^\lambda = \epsilon^\lambda bC$$

Donde se le coloca el superíndice λ a la absorbancia A y ϵ , ya que son dependientes de la longitud de onda de la medición. Si la concentración se expresa en molaridad, entonces se denomina coeficiente de extinción molar con unidades de $\text{cm}^{-1}\text{mol}^{-1}\text{L}$.

Podemos establecer una curva de calibración, midiendo la absorbancia de una especie química en disolución en función de su concentración (C) a una longitud de onda establecida, obteniendo una línea recta y de acuerdo con la ecuación $A^\lambda = \epsilon^\lambda bC$ que tiene como pendiente ϵb , conociendo el paso óptico de la celda b , se determina ϵ el coeficiente de extinción molar.

Conociendo los ϵ^λ de las especies químicas, aprovechando la propiedad aditiva de la absorbancia y con la ley de Lambert-Beer $A^\lambda = \epsilon^\lambda bC$ se puede plantear sistemas de ecuaciones para determinar la concentración de diferentes analitos en mezclas complejas (Figura 1).

El método de análisis multicomponente es esencial cuando los espectros de absorción de dos o más analitos en una mezcla se solapan. La clorofila A y la clorofila B son un ejemplo clásico. Estos pigmentos, vitales para la fotosíntesis, coexisten en el fitoplancton.

Ambos absorben en la región visible (de 630 nm a 670 nm aproximadamente), lo que impide su medición individual sin la aplicación del método de ecuaciones simultáneas.

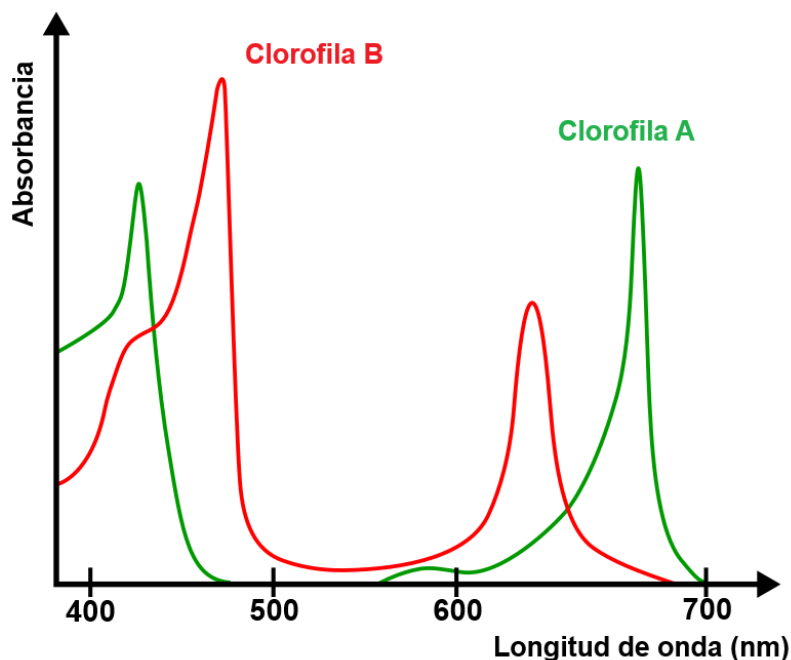


Figura 1. Espectro de absorción de clorofilas A (verde) y B (roja) en espectrofotometría UV-Vis.

2. Aplicación en las Ciencias de la Tierra

Los conceptos abordados en esta práctica son fundamentales en el monitoreo ambiental y la química acuática.

- **Eutrofización:** El fenómeno de la eutrofización ocurre cuando un cuerpo de agua (lago, laguna, presa) recibe un exceso de nutrientes (como nitratos y fosfatos). Esto provoca el crecimiento masivo y descontrolado de algas y cianobacterias, conocido como floración algal.
- **Clorofila como indicador:** La clorofila A es el pigmento fotosintético presente en todos los organismos fotosintéticos y es, por convención, el indicador estándar internacional para medir la biomasa y el estado trófico (nivel de nutrientes) de un cuerpo de agua. Su cuantificación permite clasificar el agua como oligotrófica (poca vida/nutrientes), mesotrófica o eutrófica (exceso de nutrientes).
- **Aplicación instrumental:** Al cuantificar la clorofila A y B, el alumnado aprende la metodología instrumental utilizada en los laboratorios de monitoreo de agua y centros de investigación para evaluar la calidad de un ecosistema acuático.
- Estos métodos también se aplican a otras disciplinas como las Ciencias Espaciales y las Ciencias atmosféricas.

3. Actividades previas a la sesión experimental

1. Desarrollar matemáticamente las ecuaciones necesarias para el cálculo de los componentes a partir de la ecuación de Lambert-Beer.
2. Investigar:
 - a. La aditividad de la absorbancia en la ley de Lambert-Beer.
 - b. ¿Cuántos tipos de clorofilas existen y cuál es su diferencia molecular?
 - c. ¿Cuáles son los criterios que permiten extraer un analito de su matriz?
 - d. Investigar qué se entiende por estado trófico de un lago o laguna y cómo se utiliza la concentración de clorofila A para determinarlo.
 - e. Las etiquetas SGA (Sistema Globalmente Armonizado) de todos los reactivos a utilizar en la sesión experimental.

4. Competencias promovidas en el alumnado

Capacidad de analizar cuerpos acuosos como un sistema integrado, identificando factores e interacciones que modifican la hidrosfera y sus vecindades.

5. Objetivo general

Reconocer las variables que se necesitan controlar en un análisis multicomponente al cuantificar dos analitos presentes en una misma matriz mediante espectrofotometría UV-Vis, utilizando la ecuación de Lambert-Beer para evaluar el estado trófico de sistemas acuáticos.

6. Objetivos particulares

- Evaluar pigmentos fotosintéticos según su respuesta en la región visible.
- Calcular concentraciones individuales empleando la propiedad aditiva de la absorbancia.
- Relacionar la concentración de clorofila con el grado de eutrofización de un cuerpo de agua.

7. Materiales y reactivos

Para el procedimiento experimental se requieren los materiales y reactivos que se listan en la Tabla 1.

Tabla 1. Materiales y reactivos.

Reactivos	Material
0.5 g de espinaca (<i>Spinacia</i>)	espectrofotómetro UV-Vis

<i>oleracea</i>)	
Etanol (C ₂ H ₅ OH)	celdas de cuarzo (1x1 cm)
	1 cartucho de celulosa
	1 equipo Soxhlet (con matraz bola de 250 mL y refrigerante)
	1 parrilla de calentamiento
	perlas de ebullición
	balanza analítica, naves para pesar y espátula
	pañuelos desechables
	cronómetro

Procedimiento general:

1. Extraer las clorofilas de una muestra de espinacas (*Spinacia oleracea*) en mediante extracción continua, utilizando como disolvente etanol al 80 % v/v.
2. Cuantificar a través de un análisis multicomponente las clorofilas A y B presentes en el extracto de hojas de *Spinacia oleracea*.
3. Determinar la relación clorofila A/B y discutir su significado en temas de química acuática.

8. Procedimiento experimental

1. Encender el espectrofotómetro de UV-Vis (mínimo 20 min. antes de comenzar el análisis).
2. Preparar 100 mL de una disolución acuosa de etanol al 80% v/v.
3. Pesar 100 mg de espinacas lavadas.
4. Colocar las hojas cortadas en el cartucho de celulosa.
5. Colocar 100 mL de etanol al 80 % en el matraz bola de 250 mL.
6. Colocar el sistema como se muestra en la Figura 2 e iniciar el reflujo por 40 min.
7. Medir el volumen final del extracto al finalizar el tiempo de extracción.
8. Medir cinco veces la absorbancia del extracto a 666 y 649 nm.

9. Resultados y observaciones

Tabla 2. Coeficientes de extinción de clorofila A y B (etanol al 80%v/v).

Longitud de onda (nm)	Coeficiente de extinción (mg/mL cm)	
	Clorofila A	Clorofila B
649	21.60	44.65

666	79.84	15.00
-----	-------	-------

Con las absorbancias medidas a 666 y 649 nm del extracto y los coeficientes de extinción mostrados en la Tabla 2, realizar los cálculos necesarios para determinar los μg de clorofila A, B y los totales por gramo de hoja de espinaca (Tabla 3).

Tabla 3. Mediciones de absorbancia del extracto

Medición	Absorbancia a 649 nm	Absorbancia a 666 nm
1		
2		
3		
4		
5		
Promedio		

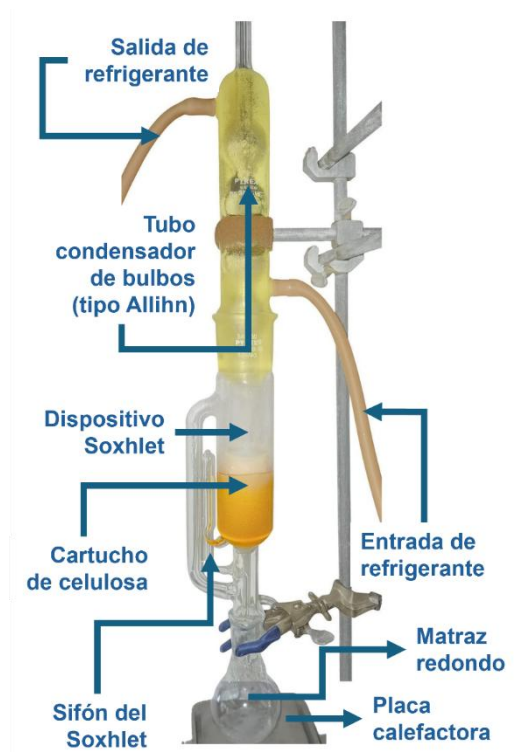


Figura 2. Equipo Soxhlet utilizado para una extracción continua.

1. Calcular las concentraciones de clorofila A y B utilizando el sistema de ecuaciones.
2. Determinar el contenido total de clorofilas por gramo de muestra.
3. Calcular la relación clorofila A/B.
4. Evaluar la precisión del método a través de las cinco mediciones repetidas.
5. Discutir las posibles fuentes de error en la extracción y cuantificación.

Tabla 4. Resultados de la cuantificación

Parámetro	Clorofila A	Clorofila B	Total
Concentración (mg/mL)			
Contenido por gramo de hoja ($\mu\text{g/g}$)			
Relación A/B			

10. Actividades posteriores a la sesión experimental

1. Elaborar un mapa conceptual que relacione los conceptos involucrados en un análisis espectrofotométrico simultáneo.
2. Discutir los alcances y las limitaciones del análisis multicomponente.
3. Investigar cómo puede ser analizada mediante espectrofotometría UV-Vis la cinética de una reacción química.
4. ¿Qué se requeriría hacer, si en una mezcla de dos componentes los dos absorben en ambas longitudes de onda?
5. ¿Qué factores podrían afectar la eficiencia de extracción de las clorofilas?
6. ¿Cómo se compara la relación clorofila A/B obtenida con valores publicados en la literatura?
7. ¿Qué consecuencias ambientales y de salud tiene un cuerpo de agua clasificado como "eutrófico"?

Referencias

1. Christian, G. D., y O'Reilly, J. E. (1986). Instrumental analysis (2.^a ed.). Allyn and Bacon.
2. Del Valle-Tascón, S., Rodríguez-García, R., y Alzola-Sánchez, C. (1995). Coeficientes de extinción de clorofilas y feofitinas (a y b) en DMSO y ecuaciones para el cálculo de sus concentraciones. Studia Botanica, 13, 115-121.
3. Robinson, K. A., y Robinson, J. F. (2001). Análisis instrumental. Pearson Educación.

Práctica No. 5. Espectroscopía infrarroja: Introducción a la técnica

Resumen

La espectroscopía infrarroja es el estudio de la interacción de la radiación infrarroja con la materia provocando cambios en los movimientos vibracionales de las moléculas. Estos cambios vibracionales se ven representados en un espectro que contiene bandas las cuales, si son bien interpretadas, pueden dar información sobre la estructura molecular en un compuesto químico. Por ello, la espectroscopía infrarroja es la técnica por excelencia para la identificación de grupos funcionales presentes en el compuesto de estudio. En esta práctica, el alumnado se familiarizará con los principios fundamentales de la espectroscopía infrarroja y el manejo del espectrofotómetro ATR-FTIR por sus siglas en inglés (Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared), aprendiendo a obtener e interpretar espectros de diferentes compuestos orgánicos para identificar sus grupos funcionales característicos. El instrumento que evalúa la interacción entre la radiación infrarroja y la materia se denomina espectrómetro de infrarrojo. (Figura 1).



Figura 1. Espectrofotómetro FTIR con ATR de punta de diamante (PerkinElmer Spectrum 100 FT-IR and FT-IR spectrometers. Estados Unidos de América: PerkinElmer, 2005).

1. Introducción

En la espectroscopía infrarroja la radiación electromagnética interactúa con la frecuencia de vibración fundamental (ν_0) de los enlaces químicos polares, provocando que continúen vibrando a la misma frecuencia, pero a una mayor amplitud, en niveles energéticos superiores al fundamental.

Las frecuencias de vibración son particulares de los átomos involucrados y de la constante de fuerza del enlace; por lo que, en un compuesto químico se tendrán tantas frecuencias de vibración como enlaces químicos tenga. Al medir y expresar gráficamente la energía absorbida por cada enlace químico se obtiene un espectro de infrarrojo característico para cada compuesto. Esto permite poder hacer un análisis estructural de los compuestos químicos relacionando los modos vibracionales de los grupos funcionales apoyándonos en tablas.

Un espectro de infrarrojo es un gráfico donde se representa como variable independiente, las frecuencias de vibración de los enlaces químicos en términos de número de onda (de 4000 a 650 cm^{-1}) y como variable dependiente el porcentaje en transmitancia o la absorbancia de la radiación infrarroja por los enlaces químicos (Figura 2).

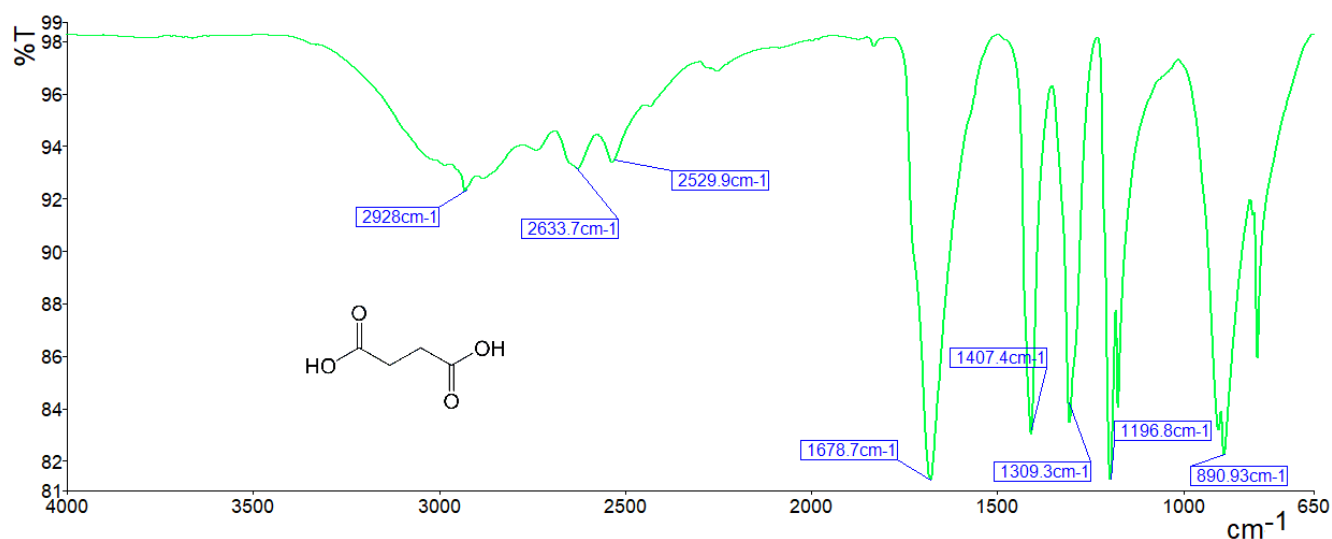


Figura 2. Espectro de infrarrojo de la molécula del ácido succínico.

2. Aplicación en las Ciencias de la Tierra

La espectroscopía infrarroja tiene amplias aplicaciones en las Ciencias de la Tierra, por ejemplo:

- En mineralogía se emplea para la identificación de minerales de arcilla, carbonatos y silicatos mediante sus bandas características.
- En geoquímica es utilizada para caracterización de materia orgánica en rocas y sedimentos.
- En las ciencias atmosféricas se emplea en la detección y cuantificación de gases de efecto invernadero.

- En las ciencias espaciales puede emplearse para el análisis de compuestos orgánicos en meteoritos y muestras planetarias y en experimentos de química prebiótica.

3. Actividades previas a la sesión experimental

Investigar:

1. ¿Cuáles son los principales modos vibracionales de una molécula?
2. ¿Cuáles son las características de un analito para poder ser analizado por espectroscopía IR?
3. ¿Cuáles son los métodos de preparación de muestra para un análisis de espectroscopía IR?
4. Investigar el funcionamiento óptico de un accesorio ATR.
5. ¿Cuál es la diferencia entre absorbancia y %transmitancia?
6. Las etiquetas SGA (Sistema Globalmente Armonizado) de todos los reactivos a utilizar en la sesión experimental.
7. Material de apoyo y preparación continua:

Para complementar el estudio teórico de la espectroscopía en el infrarrojo y familiarizarte con el equipo antes de la práctica, se requiere completar las siguientes actividades:

- Visualizar el video tutorial de Meléndez López (2021) *Obtención de un espectro infrarrojo mediante la técnica ATR-FT*.
<https://youtu.be/HpOOhjSm870?si=O59p4ANO9fS6qWL>
- Curso en Línea (MOOC): Se recomienda ampliamente tomar el curso *Espectroscopía infrarroja: Algoritmo de interpretación* a través de la plataforma Coursera (Cruz Castañeda, 2026), para consolidar los fundamentos de esta técnica instrumental. Puedes acceder al curso a través del siguiente enlace:
<https://www.coursera.org/learn/espectroscopia-infrarroja>

4. Competencias promovidas en el alumnado

Identificar bandas vibracionales características en diversos compuestos orgánicos. Emplear el accesorio ATR para el análisis no destructivo de muestras sólidas y líquidas. Distinguir señales analíticas de interferencias instrumentales en la elucidación estructural.

5. Objetivo general

Introducir y familiarizar al alumnado con la instrumentación de la espectroscopía en el intervalo del infrarrojo, mediante la obtención e interpretación de espectros ATR-FTIR, identificando grupos funcionales clave y comprendiendo la interacción radiación-materia a nivel vibracional.

6. Objetivos particulares

- Conocer el fundamento teórico de la técnica analítica de espectroscopía infrarroja.
- Comprender el funcionamiento de un espectrofotómetro ATR- FTIR.
- Ejecutar la correcta limpieza y operación del cristal ATR para muestras líquidas y sólidas.
- Analizar e interpretar el espectro de diversos compuestos orgánicos.

7. Materiales y reactivos

Para el procedimiento experimental se requieren los materiales y reactivos que se listan en la Tabla 1.

Tabla 1. Materiales y reactivos.

Reactivos	Material
Metanol (CH_3OH)	espectrofotómetro ATR- FTIR
Ácido fumárico ($\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4$)	1 espátula
Heptanol ($\text{C}_7\text{H}_{16}\text{O}$)	pañuelos desechables
Tolueno (C_7H_8)	Pipetas Pasteur, vasos de precipitados
Ácido ascórbico ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$)	
Acetona ($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$)	

8. Procedimiento experimental

1. Encender el espectrofotómetro ATR-FTIR y permitir su estabilización según las especificaciones del fabricante.
2. Obtener el espectro de infrarrojo de cada analito siguiendo el protocolo:
 - a. Limpiar la superficie del cristal ATR con un pañuelo desechable impregnado de acetona.
 - b. Colocar una pequeña cantidad de muestra sobre el cristal ATR.
 - c. Aplicar presión uniforme con el dispositivo de apriete (pistón).
 - d. Realizar la medición en el intervalo de $4000\text{-}650\text{ cm}^{-1}$ y 16 escaneos.
 - e. Guardar el espectro en formato ASCII (American Standard Code for Information Interchange) para un posterior manejo de datos con algún software especializado.
3. Realizar las mediciones para los siguientes compuestos:

• Metanol	• Tolueno
• Ácido fumárico	• Ácido ascórbico
• Heptanol	• Acetona

- Procesar los espectros identificando las bandas más intensas en cada uno.
- Para caracterizar un compuesto desconocido a través de la interpretación de su espectro de infrarrojo es necesario contar con un manual de tablas donde se indiquen los números de onda de absorción de cada grupo funcional, por ejemplo: Manual de tablas de interpretación de espectrofotometría IR, Facultad de Química, UNAM, México, 2006.

9. Resultados y observaciones

Tabla 2. Principales bandas características identificadas en los espectros.

Compuesto	Banda 1 (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Banda 2 (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Banda 3 (cm ⁻¹)	Grupo funcional
Metanol						
Ácido fumárico						
Heptanol						
Tolueno						
Ácido ascórbico						
Acetona						

- Identificar y asignar las bandas más importantes en cada espectro obtenido.
- Comparar los espectros de compuestos con grupos funcionales similares.

Tabla 3. Identificación de grupos funcionales.

Grupo funcional	Intervalo característico (cm ⁻¹)	Compuestos donde se identificó	Intensidad
OH (alcohol)	3200-3600		
OH (ácido carboxílico)	2500-3300		
C=O	1650-1750		
C-O	1000-1300		
C-H aromático	3000-3100		
C-H alifático	2800-3000		

- Discutir la relación entre la estructura molecular y las bandas observadas.
- Analizar la calidad de los espectros obtenidos y posibles interferencias.

10. Actividades posteriores a la sesión experimental

- Analizar lo siguiente después de los resultados obtenidos.
 - ¿Qué ventajas ofrece la técnica ATR frente a otras técnicas de preparación de muestras para IR?
 - ¿Qué otros métodos de medición existen para la espectroscopía IR?
 - ¿Qué limitaciones presenta la espectroscopía IR para el análisis estructural?

2. Elaborar un diagrama de flujo para la interpretación de espectros de IR.
3. Analizar aplicaciones de la espectroscopía IR en la caracterización de minerales y rocas
4. Investigar el posible uso de la espectroscopía en el infrarrojo para monitorear el avance de una reacción química.

Referencias

1. Christy, A. A., Ozaki, Y., y Gregoriou, V. G. (2001). Modern Fourier transform infrared spectroscopy. Elsevier Science.
2. Cruz Castañeda, J. A. (2026). *Espectroscopía infrarroja: Algoritmo de interpretación* [Curso en línea]. Universidad Nacional Autónoma de México; Coursera. <https://www.coursera.org/learn/espectroscopia-infrarroja>
3. De Fuentes, N. M., Bosch, O. C., y Sánchez, R. F. (2008). Aplicación de la espectroscopía infrarrojo medio en química analítica de procesos. Boletín de la Sociedad Química de México, 2(3), 93-103.
4. Facultad de Química UNAM. (2003). Manual de tablas de interpretación de espectroscopía IR. Universidad Nacional Autónoma de México. Ernestina Cervera Flores y Alina Romo Guadarrama
5. Meléndez López, A. L. [Adriana L. Meléndez López]. (23 de septiembre de 2021). *Obtención de un espectro infrarrojo mediante la técnica ATR-FT* [Video]. YouTube. <https://youtu.be/HpOOhjSm870?si=O59p4ANO9fS6qWL>
6. Silverstein, R. M., Bassler, G. C., y Morrill, T. C. (1991). Spectrometric identification of organic compounds (5.^a ed.). John Wiley y Sons.

Práctica No. 6. Identificación de grupos funcionales mediante espectroscopía infrarroja aplicada a una reacción de esterificación de Fischer

Resumen

La espectroscopía infrarroja no solo sirve para identificar sustancias puras, también es una herramienta fundamental para monitorear el progreso de una reacción química. En esta práctica, se realizará la síntesis de un éster (acetato de isoamilo) a partir de un ácido carboxílico y un alcohol (esterificación de Fischer). El alumnado se familiarizará con los principios fundamentales de la espectroscopía infrarroja y el manejo del espectrómetro ATR-FTIR, utilizará esta técnica de para analizar los reactivos y el producto final, identificando la desaparición de las bandas características por ejemplo los grupos hidroxilo (-OH), simulando el proceso de derivatización de materia orgánica común en la geoquímica orgánica y en la formación de compuestos en química prebiótica.

1. Introducción

En general, la esterificación de Fischer es la reacción entre un ácido carboxílico y un alcohol. Este equilibrio es catalizado por un ácido fuerte y los productos de reacción son un éster y agua.



En este equilibrio el mecanismo de reacción inicia con un ataque al carbono del grupo carbonilo de un ácido carboxílico por el átomo de oxígeno de un alcohol (conocido como ataque nucleofílico), produciendo un enlace éster y moléculas de agua (Figura 1) el cual puede ser catalizado por un ácido. Para desplazar el equilibrio hacia la formación de los productos (éster) basta con agregar un exceso estequiométrico de los reactivos, además de eliminar el agua del medio de reacción.

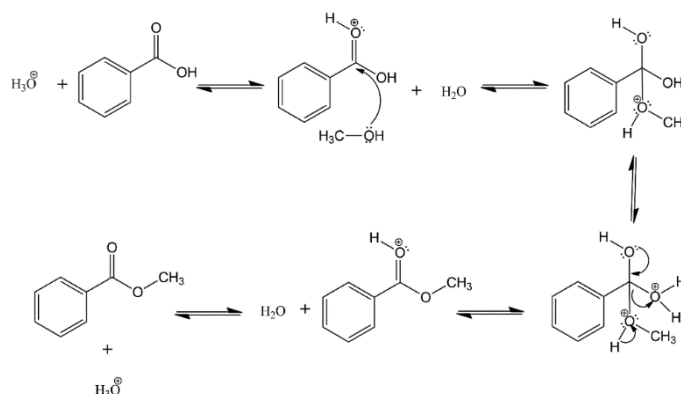


Figura 1. Mecanismo de reacción para la esterificación de Fischer del ácido benzoico.

Desde el punto de vista espectroscópico, el avance de la reacción puede ser monitoreado a través de 3 grupos funcionales:

1. Ácidos carboxílicos: Tienen una banda O-H extremadamente ancha y fuerte ($3300\text{--}2500\text{ cm}^{-1}$) y un C=O alrededor de 1710 cm^{-1} .
2. Alcoholes: Tienen una banda O-H ancha (3300 cm^{-1}), pero menos extensa que la de los ácidos carboxílicos.
3. Ésteres (producto): No tienen banda O-H. Además, su señal C=O se desplaza a una frecuencia mayor ($\sim 1740\text{ cm}^{-1}$) y aparecen bandas fuertes de C-O ($\sim 1240\text{ cm}^{-1}$).

Así, al seguir las bandas de los diferentes grupos funcionales para los reactivos (ácido carboxílico y alcohol) y para los productos (éster y agua) mediante esta técnica instrumental podemos seguir el avance de reacción de la esterificación.

2. Aplicación en las Ciencias de la Tierra

Aunque esta práctica sintetiza un aroma (aceite de plátano), el proceso químico ilustra una técnica fundamental llamada “derivatización” ampliamente usada en geoquímica, ciencias acuáticas, atmosféricas, experimentos de química prebiótica, etc.

Por ejemplo, se usa en temas de monitoreo de suelos a través de:

- Análisis de biomarcadores: Cuando se estudian lípidos o ácidos grasos en muestras de suelo, sedimentos marinos o rocas madre (para exploración petrolera o paleoclimatología), estos compuestos son demasiado polares y no volátiles para ser inyectados directamente en un cromatógrafo de gases (GC), la solución a este reto es realizar una esterificación en el laboratorio para convertir esos ácidos en ésteres metílicos de los ácidos grasos que sí son volátiles y analizables por GC.
- Control de Calidad: El uso del IR permite verificar rápidamente si la derivatización fue exitosa (desaparición del grupo ácido) antes de inyectar la muestra en equipos delicados y costosos.

3. Actividades previas a la sesión experimental

Investigar:

1. El mecanismo de reacción de la esterificación de Fischer y anótalo en la bitácora, para que tengan a la mano las estructuras químicas.
2. Buscar y dibujar los espectros IR teóricos del: ácido acético, alcohol isoamílico y acetato de isoamilo. Identificar sus diferencias clave.
3. ¿Qué bandas vibracionales se esperan que desaparezcan y cuáles que aparezcan al finalizar la reacción?
4. ¿Qué función cumple el bicarbonato de sodio y el sulfato de sodio anhidro en la etapa de purificación?

- Las etiquetas SGA (Sistema Globalmente Armonizado) de todos los reactivos a utilizar en la sesión experimental.

4. Competencias promovidas en el alumnado

Capacidad de monitorear transformaciones químicas y procesos de derivatización para el análisis químico mediante técnicas espectroscópicas.

5. Objetivo general

Realizar la síntesis de un éster mediante calentamiento a reflujo y monitorear la transformación química utilizando espectroscopía ATR-FTIR, interpretando los cambios en los grupos funcionales principales.

6. Objetivos particulares

- Ilustrar el progreso de una reacción química mediante la transformación de los grupos funcionales.
- Demostrar la formación del enlace éster identificando la pérdida del grupo hidroxilo.
- Evaluar la pureza del producto comparando espectros experimentales vs. teóricos.

7. Materiales y reactivos

Para el procedimiento experimental se requieren los materiales y reactivos que se listan en la Tabla 1.

Tabla 1. Materiales y reactivos.

Reactivos	Material
Ácido acético glacial (CH_3COOH)	espectrómetro ATR- FTIR
Alcohol isoamílico ($\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$)	1 espátula
Cloruro de sodio (NaCl disolución saturada)	pañuelos desechables
Bicarbonato de sodio (15%)	Parrilla de calentamiento
Sulfato de sodio anhidro (secante) (Na_2SO_4)	Pipetas Pasteur, vasos de precipitados
	Embudo de separación

Procedimiento general

- Realizar la síntesis de acetato de isoamilo, mediante una reacción de esterificación de Fischer.
- Obtener los espectros IR de los reactivos (ácido acético glacial y alcohol isoamílico) y del producto purificado.
- Monitorear la aparición y desaparición de bandas en el espectro de IR al inicio y al final de la reacción química.

- Interpretar los espectros para confirmar la formación del enlace éster y la pureza del producto (ausencia de reactivos).

8. Procedimiento experimental

1. Análisis de reactivos

- Obtener el espectro ATR-FTIR del ácido acético glacial. Guardar espectro.
 - Obtener el espectro ATR-FTIR del alcohol isoamílico. Guardar espectro.
- Para la obtención de un éster se utiliza alcohol isoamílico, ácido acético glacial y ácido sulfúrico como catalizador. Siguiendo el procedimiento descrito a continuación:
 - Medir 5 mL de alcohol isoamílico y transferir en un matraz bola de 100 mL. Agregar cuerpos de agitación.
 - Adicionar 6 mL de ácido acético y 0.5 mL de ácido sulfúrico.
 - Montar el sistema de reflujo (Figura 2) y calentar suavemente la mezcla durante 60 minutos.

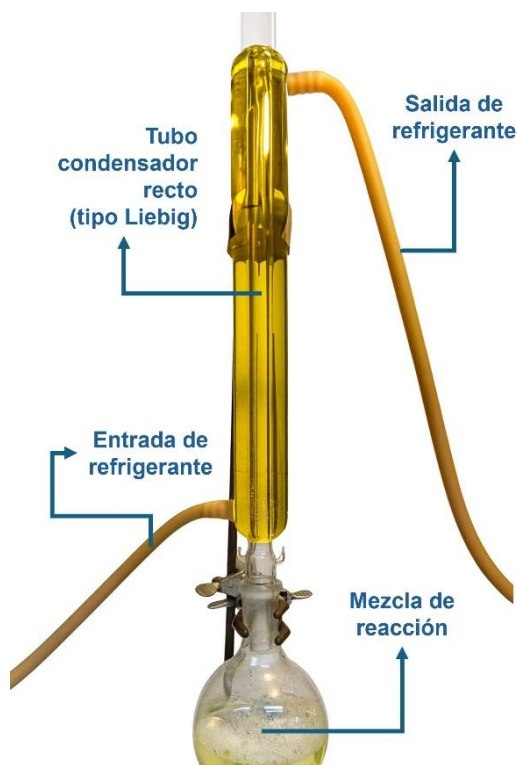


Figura 2. Sistema a reflujo.

- Preparar una disolución saturada de NaCl (10 mL por equipo).
- Preparar una disolución de NaHCO_3 al 15% (10 mL por equipo).
- Detener el reflujo y dejar enfriar la mezcla de reacción.

6. Agregar poco a poco 10 mL de una disolución de NaHCO_3 al 15%.
7. Agregar 7 mL de disolución saturada de NaCl .
8. Transferir la fase líquida a un embudo de separación (Figura 3) y separar la fase orgánica.
9. Transferir la fase orgánica (superior) a un vaso de precipitados seco y agregar una punta de espátula de sulfato de sodio anhidro. Dejar actuar por 5-10 min hasta que el líquido sea transparente.
10. Decantar el líquido limpio (acetato de isoamilo) a un vial limpio.
11. Medir y registrar el volumen obtenido del producto.
12. Obtener el espectro ATR-FTIR del producto sintetizado.

Notas importantes:

- 1) El material debe de estar perfectamente libre de impurezas y agua.
- 2) Realizar la reacción con agitación constante.



Figura 3. Sistema para separación de fases empleando embudo de separación.

9. Resultados y observaciones

Tabla 2. Interpretación de espectros de infrarrojo.

Muestra	Banda OH ácido (cm ⁻¹)	Banda C=O ácido (cm ⁻¹)	Banda C=O éster (cm ⁻¹)	Banda C-O éster (cm ⁻¹)	Otras bandas relevantes
Alcohol isoamílico					
Ácido acético					
Producto (éster)					

1. Interpreta los espectros de infrarrojo obtenidos, indicando las bandas que te permiten seguir el avance de la reacción.
2. ¿Desapareció completamente la banda ancha en ~3300 cm⁻¹ Si no, ¿a qué se debe (agua o alcohol sin reaccionar)?

10. Actividades posteriores a la sesión experimental

1. ¿Cuáles son las bandas que se deben monitorear para observar el avance de reacción en una esterificación de Fischer?
2. ¿Cómo se puede asegurar que la reacción química ha terminado?
3. Indicar si la anterior metodología experimental puede tener algún error al monitorear las bandas correspondientes a los productos, indicar cómo asegurarse que éste hecho no ocurra.
4. En el contexto de las Ciencias de la Tierra: Si una persona geoquímica omite el paso de secado con sulfato de sodio, ¿cómo afectaría al análisis posterior de la muestra mediante cromatografía de gases?
5. Investigar el mecanismo de reacción de una condensación aldólica y explica cómo seguirías el avance de reacción a través de la espectroscopía en el infrarrojo.

Referencias

1. Facultad de Química UNAM. (2006). Manual de tablas de interpretación de espectroscopía IR. Universidad Nacional Autónoma de México.
2. Harris, D. C. (2003). Análisis químico cuantitativo (3.^a ed.). Editorial Reverté.
3. McMurry, J. (2008). Química orgánica (7.^a ed.). Cengage Learning.
4. Morrison, R. T., y Boyd, R. N. (1998). Química orgánica (5.^a ed.). Pearson Educación.
5. Solomons, T. W. G. (1997). Fundamentals of organic chemistry. John Wiley y Sons.

Práctica No. 7. Cromatografía en capa fina: Identificación de terpenos en flores de manzanilla

Resumen

La cromatografía es un método físico de separación de mezclas robusto, que aprovecha la afinidad química de los componentes de la mezcla entre dos fases inmiscibles. La cromatografía en capa fina es ampliamente empleada en los laboratorios como un método rápido de monitoreo, ya que no requiere de equipamiento sofisticado y contiene ventajas frente a otros métodos cromatográficos al ser precisa, simple y con resultados altamente reproducibles. En esta práctica, el alumnado aprenderá los principios fundamentales de la cromatografía en capa fina mediante la separación e identificación de terpenos en extractos de manzanilla, desarrollando habilidades en la preparación de cromatoplasmas, selección de fases móviles y cálculo de factores de retención, competencias esenciales para el análisis de muestras naturales en el contexto de las Ciencias de la Tierra.

1. Introducción

Resultado de su interés por estudiar pigmentos vegetales puros, el botánico ruso Tswett elaboró una metodología que consistió en extraer y separar con éter pigmentos vegetales a través de una columna de vidrio rellena de carbonato de calcio, este experimento separativo generó lo que en la actualidad conocemos como cromatografía.

La cromatografía consta de dos fases inmiscibles, una siempre permanece fija (fase estacionaria), la otra fluye a través de la fija (fase móvil). La separación en la cromatografía es resultado de afinidad relativa cada sustancia por ambas fases y el respectivo equilibrio de distribución.

Existen diferentes tipos de cromatografía. La cromatografía en capa fina se compone de una superficie homogénea delgada (adsorbente-fase estacionaria) sobre una placa de vidrio u otro soporte inerte como aluminio o acetato de celulosa, por la que atraviesa una fase móvil o eluyente, el cual es un disolvente de diferente polaridad ya que, la polaridad juega un papel importante en la cromatografía en capa fina. El eluyente es seleccionado con base en varios factores: polaridad, poca volatilidad, precio, pureza, reproducibilidad, etc.

El procedimiento experimental que se lleva a cabo para realizar una cromatografía en capa fina consiste en colocar los componentes a separar sobre la fase estacionaria la cual se pondrá dentro de una cámara cromatográfica que contiene la fase móvil y a medida que la fase móvil asciende o desciende a través del adsorbente se produce la separación debido al reparto diferencial de los componentes de la mezcla entre la fase estacionaria y la fase móvil. Por último, si el analito no presenta color, se requiere de algún método que permita visualizar la separación de los componentes de la mezcla: yodo, luz UV, ácido sulfúrico, etc. (Figura 1), lo que se conoce como proceso de revelar.

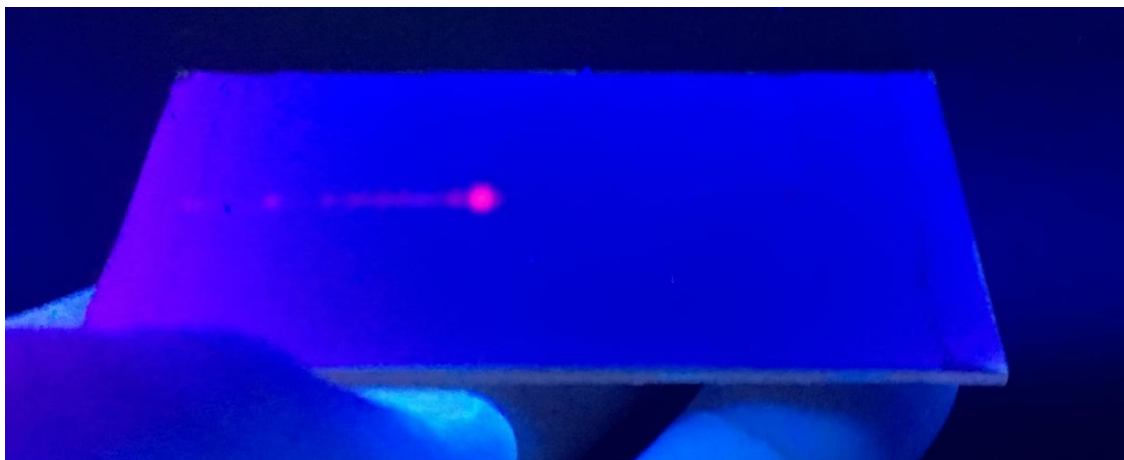


Figura 1. Revelado de cromatoplaqa con luz UV.

2. Aplicación en las Ciencias de la Tierra

La cromatografía en capa fina tiene diversas aplicaciones en el ámbito de las Ciencias de la Tierra por ejemplo en:

- Geoquímica orgánica: Separación e identificación de biomarcadores en rocas y sedimentos.
- Hidrogeología: Análisis de contaminantes orgánicos en aguas subterráneas.
- Edafología: Estudio de compuestos orgánicos en suelos y su transformación.
- Biogeoquímica: Análisis de metabolitos secundarios en plantas y su relación con el ambiente.
- Química ambiental: Monitoreo de pesticidas y contaminantes en muestras ambientales.

3. Actividades previas a la sesión experimental

Investigar:

1. ¿Qué grupos de compuestos químicos se pueden ser extraídos de la flor de manzanilla?
2. ¿Qué criterios se deben considerar para elegir una fase estacionaria adecuada en cromatografía?
3. ¿Qué criterios se deben considerar para elegir una fase móvil adecuada en cromatografía?
4. El concepto de retención en cromatografía y su importancia en la separación.
5. ¿Cuál es la estructura química (y polaridad relativa) de los β -carotenos, clorofila A, clorofila B y xantofilas? Ordénalos de menor a mayor polaridad.
6. ¿Por qué el gel de sílice (SiO_2) se considera una fase estacionaria polar?

7. Las etiquetas SGA (Sistema Globalmente Armonizado) de todos los reactivos a utilizar en la sesión experimental.

4. Competencias promovidas en el alumnado

Practicar la elución cromatográfica controlando variables como la polaridad de la fase móvil. Evaluar la eficiencia de métodos de separación basados en la afinidad química. Diferenciar analitos basándose en sus factores de retención (R_f).

5. Objetivo general

Introducir y familiarizar al alumnado con los principios fisicoquímicos de la separación cromatográfica mediante la técnica de capa fina ampliamente utilizada en el análisis químico, desarrollando la separación e identificación de algunos pigmentos presentes en un extracto orgánico en función de su polaridad.

6. Objetivos particulares

- Elaborar una cromatoplaqueta de gel de sílice sobre una superficie de vidrio.
- Ilustrar la separación por cromatografía en capa fina de los terpenos presentes en el extracto de flores de manzanilla (*Matriacaria chamomilla*) empleando tres diferentes fases estacionarias y tres fases móviles diferentes.
- Identificar los posibles compuestos presentes en las flores de manzanilla (*Matriacaria chamomilla*) a través de su pigmentación y sus coeficientes de retención en una cromatoplaqueta (R_f).
- Relacionar el orden de elución con la polaridad de las moléculas y la fase estacionaria.

7. Materiales y reactivos

Para el procedimiento experimental se requieren los materiales y reactivos que se listan en la Tabla 1.

Tabla 1. Materiales y reactivos.

Reactivos	Material
Tolueno ($C_6H_5CH_3$)	pipetas Pasteur
Dimetilcetona $CH_3(CO)CH_3$	balanza analítica, naves para pesar y espátula
Acetato de etilo ($C_4H_8O_2$)	10 portaobjetos de vidrio
Gel de sílice 60	vaso de precipitados de 100 mL
Agua bidestilada	probeta de 50 mL
2 g de flores de manzanilla (<i>Matriacaria chamomilla</i>)	embudo de separación

Cromatoplasmas comerciales de gel de sílice- acetato	1 parrilla de calentamiento
Cromatoplasmas comerciales de alúmina-aluminio	agitador magnético
Cromatoplasmas de celulosa	cámaras de elución
Yodo (I ₂)	lámpara de UV de 365 nm

8. Procedimiento experimental

1. Preparación de cromatoplasmas.

- Pesar 35 g de gel de sílice 60 y suspenderlos con 60 mL de agua bidestilada.
- Sumergir dos portaobjetos unidos por sus caras en la suspensión preparada previamente, retirar de la suspensión, separar los cubre objetos, dejar secar en la campana y retirar el exceso de las orillas del cubreobjeto.

2. Preparación de extracto de flores de manzanilla.

- Pesar 2 g de flores de manzanilla en un vaso de precipitados de 100 mL.
- Agregar 10 mL de dimetilcetona y calentar a 40°C con agitación continua por 10 minutos.
- Evaporar a sequedad con calentamiento moderado 60°C.
- Resuspender el sólido precipitado con 1 mL de tolueno (trabajar en la campana).

3. Preparación de las fases móviles (trabajar en la campana).

- 10 mL de una disolución 93:7 tolueno:acetato de etilo
- 10 mL de una disolución 50:50 tolueno:acetato de etilo
- 10 mL de una disolución 7:93 tolueno:acetato de etilo

4. Elución cromatográfica.

- De ser necesario cortar las cromatoplasmas comerciales (gel de sílice-acetato, alúmina-alumino y celulosa) de 2.5 x 7.5 cm.
- Marcar a una distancia de 0.5 cm una línea con lápiz las 4 diferentes cromatoplasmas (preparada, gel de sílice-acetato, alúmina-alumino y celulosa).

Nota: Tener precaución de no dañar la superficie de la cromatoplasma con el lápiz.

- Tomar una muestra del extracto de flores de manzanilla con una pipeta Pasteur o capilar y colocar una gota al centro de la línea. Dejar que se evapore y repetir 5 veces más en el mismo punto.

Nota: evitar que la gota sea muy grande, intentar colocar la muestra lo menos dispersa del punto de aplicación.

- d. Introducir las diferentes cromatoplas en forma vertical en la cámara de elución, la cual debe estar cerrado para asegurar que la cámara está saturada de los vapores de la fase móvil, cerciorándose que el nivel de la fase móvil se encuentre por debajo de la línea marcada en la cromatoplas, tapar el sistema y esperar la elución hasta máximo 0.5 cm antes de borde superior de la cromatoplas (Figura 2).

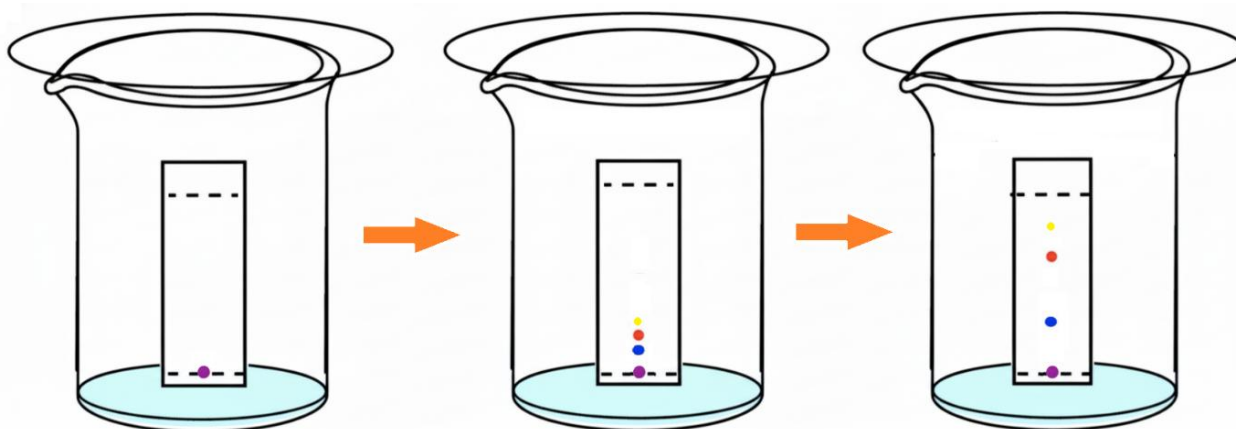


Figura 2. Cámara de elución de un sistema cromatográfico de capa fina.

- e. Medir la distancia entre el punto de aplicación el punto final de la elución.
f. Identificar y marcar el número y color de los componentes separados, revelando las cromatoplas con la lámpara de UV.
g. Identificar y marcar el número de los componentes separados, revelando las cromatoplas con I_2 .
h. Comparar los valores de R_f obtenidos con los mostrados en la Tabla 2.

Tabla 2. Identificación de compuestos de la manzanilla separados por cromatografía en capa fina con eluyente una mezcla 7:93 tolueno:acetato de etilo. (Modificada de Valencia, G et al., 2001).

R_f	Coloración	Compuesto
0.2	Amarillo/verde	Óxidos A y B de bisabolol
0.25	Violeta	Alcohol terpenoide
0.35	Violeta	Bisabolol
0.5-0.6	Pardo	Pilinas
0.95	Rojo-violeta	Azuleno
0.99	Azul-violeta	Farneseno

9. Resultados y observaciones

Con los resultados obtenidos completa las siguientes tablas (Tablas 3 y 4):

Tabla 3. Se muestra los componentes separados por cromatografía en capa fina variando la fase móvil y la fase estacionaria.

Fase estacionaria	Número de compuestos separados	
	Lámpara de UV de 365 nm	Yodo (I ₂)
	93:7 tolueno:acetato de etilo	
sílice - vidrio		
sílice - acetato		
alúmina - aluminio		
celulosa		
	50:50 tolueno:acetato de etilo	
sílice - vidrio		
sílice - acetato		
alúmina-aluminio		
celulosa		
	7:93 tolueno:acetato de etilo	
sílice - vidrio		
sílice - acetato		
alúmina - aluminio		
celulosa		

Tabla 4. Muestra el RF de los compuestos separado con la mezcla 7:93 tolueno:acetato de etilo.

Número de banda	Coloración a UV ³⁶⁵	Distancia en mm del punto de aplicación	Rf	Posible compuesto
1				
2				
3				
4				
5				
6				

10. Actividades posteriores a la sesión experimental

1. Elaborar un mapa mental referente a la cromatografía y los parámetros más importantes a considerar.
2. Con los resultados obtenidos ¿Cuál consideras el mejor sistema cromatográfico para la separación e identificación de terpenos de la flor de manzanilla?
3. Discutir los alcances y las limitaciones de la cromatografía en capa fina.
4. ¿Cómo se relaciona la polaridad de los compuestos con sus valores de R_f en diferentes sistemas de disolventes?
5. Investigar aplicaciones de la cromatografía en capa fina en el análisis de muestras de interés en las Ciencias de la Tierra.

Referencias

1. Ávila-Zárraga, J. G., et al. (2001). Química Orgánica: Experimentos con un enfoque ecológico. Dirección General de Publicaciones y Fomento Editorial, UNAM.
2. Harris, D. C. (2003). Análisis químico cuantitativo (3.^a ed.). Editorial Reverté.
3. Valencia, P. G. A., y Martínez, A. (2001). Guía para el reconocimiento de drogas vegetales por cromatografía en capa fina. Universidad de Antioquia.

Práctica No. 8. Cromatografía de gases: Separación de hidrocarburos y caracterización de fracciones de petróleo

Resumen

La cromatografía de gases (CG) es una técnica analítica de separación de mezclas de compuestos volátiles y semivolátiles térmicamente estables, basada en la afinidad de los analitos entre la fase estacionaria y la fase móvil. En CG la fase móvil es un gas químicamente inerte a la muestra como hidrógeno, helio o nitrógeno y la fase estacionaria es un sólido (cromatografía gas-sólido) o un líquido soportado en un sólido inerte (cromatografía gas-líquido). En esta práctica, el alumnado se familiarizará con los principios de la cromatografía de gases acoplada a un detector de ionización de llama (FID), aprendiendo a resolver e identificar los componentes de una mezcla de hidrocarburos, y comprendiendo la utilidad de esta poderosa técnica instrumental en el análisis de compuestos volátiles en el contexto de las Ciencias de la Tierra. Se evaluará el efecto de la programación de la temperatura frente al modo isotérmico, comprendiendo cómo esta variable es crítica para la resolución de mezclas complejas en la geoquímica del petróleo y otras áreas del conocimiento en Ciencias de la Tierra.

1. Introducción

Aunque los principios fundamentales de la cromatografía son los mismos en los diversos tipos de esta técnica, la cromatografía se clasifica de acuerdo al estado de agregación de la fase móvil. En la cromatografía de gases la fase móvil fluye a cierta presión en una tubería denominada columna, la cual contiene a la fase estacionaria (sólido o líquido). La columna puede estar completamente rellena con la fase estacionaria o bien solo depositada sobre las paredes de un tubo capilar (0.25 mm de diámetro interno) que puede tener hasta 100 m de largo. Este tipo de columnas se conocen como columnas empacadas o columnas capilares respectivamente, las columnas cromatográficas son las que aportan la mayor capacidad separativa en un sistema.

En CG, la separación se lleva a cabo principalmente por una combinación de dos factores: 1) punto de ebullición; y 2) las diferencias de afinidad entre los diferentes componentes por la fase estacionaria. Una buena separación cromatográfica involucra tres parámetros que indican el grado de separación de los componentes: 1) la eficiencia; 2) la selectividad; y 3) la resolución. Estos tres parámetros están en función del tiempo de retención (t_R), la distancia entre los picos y la forma de los picos. El tiempo de retención, es reproducible y particular de cada compuesto bajo los parámetros experimentales establecidos y una columna específica.

El requisito que debe cumplir una muestra para poder ser analizado mediante cromatografía de gases es que debe ser volátil y térmicamente estable a la temperatura de operación, la cual debe ser menor a 300°C.

En la CG-FID (Figura 1), los compuestos son analizados con un detector de ionización de flama, el cual responde a los iones formados por todos los compuestos que pueden quemarse en la pequeña flama que se encuentra en el detector.

Dentro de las ventajas de la técnica se puede mencionar su costo razonable de análisis, un fácil manejo instrumental y el corto tiempo del análisis (de 5 a 10 min en la mayoría de las muestras) obteniendo una alta resolución. Mientras que las principales desventajas son: que la técnica es destructiva, es una técnica que requiere muestras estándar y experiencia instrumental.



Figura 1. Cromatógrafo de gases-FID.

2. Aplicación en las Ciencias de la Tierra

La cromatografía de gases tiene numerosas aplicaciones en las Ciencias de la Tierra por ejemplo en:

- Geoquímica orgánica: Identificación de biomarcadores en sedimentos y rocas.
- Hidrogeología: Detección de contaminantes orgánicos volátiles en aguas subterráneas.
- Ciencias atmosféricas: Análisis de compuestos orgánicos volátiles en la atmósfera.
- Vulcanología: Monitoreo de gases volcánicos y sus variaciones composicionales.
- Un ejemplo particular es en la clasificación geoquímica del petróleo. (fingerprinting), donde el crudo compuesto por miles de hidrocarburos es analizado por CG permitiendo obtener la "huella digital" cromatográfica del petróleo, identificando biomarcadores que revelan la edad geológica de la roca madre, su ambiente de depósito (marino vs. lacustre) y el grado de madurez térmica.
- En el análisis de muestras extraterrestres de relevancia en evolución química.

3. Actividades previas a la sesión experimental

Investigar:

1. Un diagrama general de los componentes que integran un cromatógrafo de gases y registrarlo en la bitácora.
2. ¿Cuál es la diferencia entre una columna empacada y una columna capilar?
3. ¿Cuáles son los gases más utilizados como acarreadores en la cromatografía de gases?
4. Tipos de detectores utilizados en la cromatografía de gases.
5. Explicar el funcionamiento del detector FID. ¿Por qué es ideal para hidrocarburos y no sirve para agua?
6. Los conceptos y ecuaciones para el cálculo de: eficiencia, selectividad y resolución (R_s) en un cromatograma.
7. Las etiquetas SGA (Sistema Globalmente Armonizado) de todos los reactivos a utilizar en la sesión experimental.

4. Competencias promovidas en el alumnado

Optimizar parámetros de separación en sistemas GC-FID para caracterizar mezclas complejas de hidrocarburos de interés geológico y ambiental.

5. Objetivo general

Introducir y familiarizar al alumnado con las principales partes que integran un cromatógrafo de gases, así como comprender el efecto de la temperatura en la separación cromatográfica de gases, optimizando las condiciones de operación para separar una mezcla de hidrocarburos. Finalmente, mostrar al alumnado las ventajas y las limitaciones de la cromatografía de gases.

6. Objetivos particulares

- Operar un cromatógrafo de gases, identificando sus componentes principales (inyector, columna, detector).
- Obtener el cromatograma de una mezcla de hidrocarburos en condiciones isotérmicas.
- Obtener el cromatograma de la misma mezcla utilizando una rampa de temperatura.
- Comparar la resolución y el tiempo de análisis de ambos métodos.
- Calcular los parámetros cromatográficos de eficiencia, selectividad y resolución.
- Identificar mediante el tiempo de retención de estándares los componentes de mezcla problema de hidrocarburos.
- Categorizar el impacto del modo de operación en la eficiencia y tiempo de análisis.

7. Materiales y reactivos

Para el procedimiento experimental se requieren los materiales y reactivos que se listan en la Tabla 1.

Tabla 1. Materiales y reactivos.

Reactivos	Material
Hexano (C_6H_{14})	Cromatógrafo de gases con detector de ionización de flama (CG-FID)
Heptano (C_7H_{16})	Columna capilar MTX-volátiles de 30 m
Octano (C_8H_{18})	Jeringa cromatográfica de 10 μ L
Nonano (C_9H_{20})	Vaso de precipitados de 100 mL
Decano ($C_{10}H_{22}$)	
Hexadecano ($C_{16}H_{34}$)	
Heneicosano ($C_{21}H_{44}$)	

8. Procedimiento experimental

1. Mezcla problema de hidrocarburos.

El profesorado elaborará una mezcla problema con cuatro hidrocarburos de la lista de reactivos.

2. Preparación del equipo.

- Verificar presiones de gases (He, H_2 , aire).
- Encender el equipo y establecer temperaturas del inyector y del detector:
 - Inyector: 250°C
 - Detector (FID): 280°C

3. Análisis cromatográfico de hidrocarburos como estándares.

- Establecer los parámetros cromatográficos (configuración del horno)
 - Isoterma: temperatura constante, por ejemplo, 100 °C (intermedia entre los puntos de ebullición de los componentes).
 - Programa de temperatura variable, por ejemplo:
 - Temperatura inicial: 40°C mantener 1 minuto).
 - Rampa: 5°C/min.
 - Temperatura final: 150°C (mantener 2 minutos).
- Injectar 1 μ L de cada uno de los hidrocarburos.

4. Separación cromatográfica.

- Establecer los parámetros cromatográficos (configuración del horno)
 - Isoterma: temperatura constante, por ejemplo, 100 °C (intermedia entre los puntos de ebullición de los componentes).

II. Programa de temperatura variable, por ejemplo:

- Temperatura inicial: 40°C mantener 1 minuto).
- Rampa: 5°C/min.
- Temperatura final: 150°C (mantener 2 minutos).

- b) Inyectar 1 μL de la mezcla de hidrocarburos.
- c) Repetir los pasos a) y b) del punto 4, hasta lograr una separación con eficiencia, selectividad y resolución aceptables.

5. Análisis de datos cromatográficas

- a) Registrar los cromatogramas obtenidos.
- b) Identificar los picos en el cromatograma mediante sus tiempos de retención.
- c) Calcular los parámetros cromatográficos.

9. Resultados y observaciones

Con los resultados obtenidos completa la Tablas 2 y 3.

- a) Calcular la resolución (R_s) entre los picos críticos (los que estén más cerca) para ambos métodos.

Tabla 2. Análisis de hidrocarburos como estándares.

Componente	Punto de Ebullición (°C)	t_R (Isotérmico)	t_R (Rampa)	Ancho de pico $W_{1/2}$ (Rampa)
Hexano (C_6H_{14})				
Heptano (C_7H_{16})				
Octano (C_8H_{18})				
Nonano (C_9H_{20})				
Decano ($\text{C}_{10}\text{H}_{22}$)				
Hexadecano ($\text{C}_{16}\text{H}_{34}$)				
Heneicosano ($\text{C}_{21}\text{H}_{44}$)				

- b) Comparación: ¿Qué método cromatográfico ofreció picos más agudos y mejor definidos? ¿Cuál fue más rápido?
- c) Identificación: En la CG-FID, la identificación se basa principalmente en el tiempo de retención. ¿Qué pasaría si inyectaras una sustancia desconocida

que tuviera el mismo tiempo de retención que el heptano? ¿Cómo sabrías si es heptano o no?

Tabla 3. Separación de hidrocarburos.

Componente de la mezcla	Tiempo de retención (min)	Área bajo la curva	Ancho del pico en la base	Ancho del pico a media altura	Posible compuesto
1					
2					
3					
4					

10. Actividades posteriores a la sesión experimental

1. Elaborar un mapa mental referente a la cromatografía de gases y los parámetros más importantes a considerar para lograr una buena separación.
2. Con los resultados obtenidos. Calcular la eficiencia, selectividad y resolución del cromatograma obtenido.
3. Discutir los alcances y las limitaciones de la cromatografía de gases.
4. ¿Cómo influye la polaridad de la fase estacionaria en la separación de diferentes tipos de compuestos?
5. Analizar las ventajas y desventajas del detector FID frente a otros detectores en cromatografía de gases.
6. Investigar aplicaciones específicas del GC-FID en el análisis de muestras relevantes en las Ciencias de la Tierra.
7. Observando tus resultados, explica por qué es indispensable usar rampas de temperatura para analizar una muestra de petróleo crudo, que contiene desde gases (C₁) hasta asfaltos (C₄₀).

Referencias

1. Cruz Castañeda, J. A. (2008). Reacciones en el ácido behénico inducidas con temperatura y radiación gamma adsorbido en una arcilla [Tesis de Licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México]. Repositorio Institucional de la UNAM.
2. Charlot, G. (1975). Química analítica general (Tomo II y IV, 2.^a ed.). Toray-Masson.
3. Harris, D. C. (2003). Análisis químico cuantitativo (3.^a ed.). Editorial Reverté.
4. Willard, H. H., Merritt, L. L., Dean, J. A., y Settle, F. A. (1991). Métodos instrumentales de análisis. Grupo Editorial Iberoamérica.
5. Speight, J. G. (2015). Handbook of petroleum product analysis (2.^a ed.). John Wiley y Sons.

Evaluación de desempeño: Bitácora de laboratorio

El objetivo de la bitácora de laboratorio es mantener un registro cronológico, personal e inalterable de toda la actividad experimental, el cual constituye el respaldo legal y científico de la investigación. Se deben documentar con rigor técnico los procedimientos, observaciones directas y datos crudos para garantizar la trazabilidad, transparencia y reproducibilidad de los experimentos. Este documento es la base indispensable para la comunicación de hallazgos y asegura la integridad científica requerida en el ejercicio profesional de las Ciencias de la Tierra.

Práctica	Evaluación de desempeño	Observaciones
Preparación de disoluciones: Principios básicos		
Análisis volumétrico: Valoración de una reacción de neutralización		
Cuantificación de un contaminante emergente (paracetamol) en agua por espectrofotometría UV-Vis		
Análisis multicomponente: Cuantificación de clorofila A y B en muestras de agua mediante espectrofotometría UV-Vis		
Espectroscopía infrarroja: Introducción a la técnica		
Identificación de grupos funcionales mediante espectroscopía infrarroja aplicada a una reacción de esterificación de Fischer		
Cromatografía en capa fina: Identificación de terpenos en flores de manzanilla		
Cromatografía de gases: Separación de hidrocarburos y caracterización de fracciones de petróleo		

Instrumento de evaluación: Bitácora de laboratorio

Rúbrica: Bitácora de laboratorio

Criterio	Excelente (100%)	Satisfactorio (80%)	Requiere mejora (60%)	Inadecuado (<60%)
Integridad y seguridad (SGA)	Identifica y adjunta correctamente las etiquetas SGA de todos los reactivos y describe el protocolo de manejo de residuos específico de la sesión y el equipo de protección personal utilizado.	Incluye la mayoría de las etiquetas SGA, pero omite detalles menores sobre la disposición final de residuos.	Omite pictogramas de seguridad o no especifica la clasificación de los residuos generados.	No incluye información de seguridad o ignora por completo el manejo de residuos.
Metrología y trazabilidad	Registra rigurosamente la operación de los equipos e instrumentos al igual que los materiales, preparación de estándares, blancos y muestras. Anota mediciones con unidades correctas, cifras significativas y trazabilidad de los reactivos (pureza).	Registra los datos experimentales, pero presenta inconsistencias como el uso de cifras significativas, falta de unidades, nomenclatura o pureza de compuestos.	Los datos son incompletos, carecen de unidades claras o no se documentó la preparación de los blancos/estándares de calibración.	Faltan datos críticos que impiden realizar los cálculos o evaluar las respuestas analíticas de equipos e instrumentos.
Observaciones y registro	Describe paso a paso las condiciones del equipo (ej. longitud de onda, flujos de gases, temperaturas). Documenta cambios físicos, dificultades técnicas y desviaciones del protocolo con lenguaje técnico.	Documenta el proceso y los parámetros básicos del equipo, pero sus observaciones cualitativas sobre el desarrollo del experimento carecen de profundidad técnica.	El registro es casi una transcripción del manual; anota resultados finales, pero omite las condiciones bajo las cuales operó el instrumento.	No hay registro del procedimiento real ni de las condiciones de operación del equipo instrumental. No refleja lo acontecido realmente en el laboratorio.
Estructura y respaldo	Presenta índice actualizado, folios, fechas, firmas. No usa corrector; los errores se testan con una línea simple. Pega o adjunta correctamente impresiones de datos crudos (espectros, cromatogramas).	La bitácora está ordenada, pero falta algún dato, fecha, o el índice está desactualizado. Los datos impresos están anexados de forma desordenada.	Presenta uso de corrector, páginas en blanco sin anular, o los datos crudos del equipo no están adjuntos en la bitácora.	Documento en hojas sueltas, a lápiz, ilegible o que rompe los principios básicos de un documento de respaldo científico.

Evaluación de desempeño: Informe de resultados

El informe de resultados es un documento analítico, estructurado y sintético que comunica los hallazgos, metodologías y conclusiones de una investigación experimental, su objetivo primordial es presentar un argumento científico basado en la evidencia registrada, exigiendo un alto nivel de rigor, precisión y objetividad para permitir la evaluación crítica por parte de la comunidad profesional.

Práctica	Evaluación de desempeño	Observaciones
Preparación de disoluciones: Principios básicos		
Análisis volumétrico: Valoración de una reacción de neutralización		
Cuantificación de un contaminante emergente (paracetamol) en agua por espectrofotometría UV-Vis		
Análisis multicomponente: Cuantificación de clorofila A y B en muestras de agua mediante espectrofotometría UV-Vis		
Espectroscopía infrarroja: Introducción a la técnica		
Identificación de grupos funcionales mediante espectroscopía infrarroja aplicada a una reacción de esterificación de Fischer		
Cromatografía en capa fina: Identificación de terpenos en flores de manzanilla		
Cromatografía de gases: Separación de hidrocarburos y caracterización de fracciones de petróleo		

Instrumento de evaluación: Informe de resultados

Rúbrica: Informe de resultados

Criterio	Excelente (100%)	Satisfactorio (80%)	Requiere mejora (60%)	Inadecuado (<60%)
Análisis y procesamiento instrumental	Diferencia con claridad entre señales analíticas e interferencias. Evalúa la calidad de la calibración (ej. linealidad, R^2) y categoriza el impacto de variables instrumentales.	Describe los resultados correctamente, pero el análisis de la calidad de la calibración o de las variables instrumentales es superficial.	Presenta datos procesados, pero no realiza una interpretación técnica de las señales del equipo frente a la muestra.	Presenta los datos crudos sin procesar, o la interpretación de los resultados instrumentales es incorrecta.
Gestión de la Incertidumbre	Calcula e interpreta el error porcentual y la incertidumbre. Discute el papel de blancos analíticos, muestras control o estándares para validar la exactitud y precisión.	Realiza los cálculos de error, pero no discute adecuadamente las fuentes de error sistemático o aleatorio, ni el uso de muestras de control de calidad en su flujo de trabajo.	Omite cálculos clave o presenta resultados con una precisión (cifras significativas) que no es acorde a la instrumentación utilizada.	No incluye tratamiento estadístico de los datos ni evaluación de la incertidumbre de la medición analítica.
Contextualización en Ciencias de la Tierra	Relaciona críticamente los hallazgos analíticos con problemáticas reales (eutrofización, contaminantes emergentes o caracterización de hidrocarburos).	Menciona la aplicación ambiental, geológica, atmosférica, etc. de forma genérica sin profundizar en el vínculo interdisciplinario.	El informe se limita a la química pura; no vincula los resultados analíticos con el contexto de las Ciencias de la Tierra o la problemática planteada.	Las conclusiones o el marco teórico están totalmente desconectados del propósito de la práctica en el área de las Ciencias de la Tierra.
Comunicación científica y síntesis	Construye argumentos científicos claros y sintéticos basados en evidencia. Elabora diagramas de flujo y gráficas con estándares de publicación (ejes, unidades, leyendas). Uso homogéneo en la presentación de las referencias.	Sigue la estructura sugerida y las gráficas son claras, pero la redacción es algo redundante, faltan leyendas descriptivas en algunas figuras o hay errores menores en las citas.	El documento es desorganizado, contiene errores ortográficos. Las gráficas generadas por el instrumento se pegan sin formato adicional, careciendo de títulos o unidades claras. Faltan referencias.	El reporte es un plagio parcial, carece de estructura científica, o la redacción y presentación gráfica impiden la comprensión de los resultados.

Bibliografía general

1. Ávila-Zárraga, J. G., et al. (2001). Química Orgánica: Experimentos con un enfoque ecológico. Dirección General de Publicaciones y Fomento Editorial, UNAM.
2. Ayres, G. H. (1970). Análisis químico cuantitativo (2.^a ed.). Harla.
3. Bloom, B. S. (Ed.). (1956). *Taxonomy of educational objectives: The classification of educational goals* (Vol. 1). Longmans, Green.
4. Chang, R. (2010). Química (10.^a ed.). McGraw-Hill/Interamericana Editores.
5. Charlot, G. (1975). Química analítica general (Tomo II y IV, 2.^a ed.). Toray-Masson.
6. Christian, G. D., y O'Reilly, J. E. (1986). Instrumental analysis (2.^a ed.). Allyn and Bacon.
7. Christy, A. A., Ozaki, Y., y Gregoriou, V. G. (2001). Modern Fourier transform infrared spectroscopy. Elsevier Science.
8. Cruz Castañeda, J. A. (2008). Reacciones en el ácido behénico inducidas con temperatura y radiación gamma adsorbido en una arcilla [Tesis de Licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México]. Repositorio Institucional de la UNAM
9. Cruz Castañeda, J. A. (2026). *Espectroscopía infrarroja: Algoritmo de interpretación* [Curso en línea]. Universidad Nacional Autónoma de México; Coursera. <https://www.coursera.org/learn/espectroscopia-infrarroja>
10. De Fuentes, N. M., Bosch, O. C., y Sánchez, R. F. (2008). Aplicación de la espectroscopía infrarrojo medio en química analítica de procesos. Boletín de la Sociedad Química de México, 2(3), 93-103.
11. Del Valle-Tascón, S., Rodríguez-García, R., y Alzola-Sánchez, C. (1995). Coeficientes de extinción de clorofilas y feofitinas (a y b) en DMSO y ecuaciones para el cálculo de sus concentraciones. Studia Botanica, 13, 115-121.
12. Facultad de Química UNAM. (2006). Manual de tablas de interpretación de espectrofotometría IR. Universidad Nacional Autónoma de México.
13. Harris, D. C. (2001). Análisis químico cuantitativo (2.^a ed.). Editorial Reverté.
14. Harris, D. C. (2003). Análisis químico cuantitativo (3.^a ed.). Editorial Reverté.
15. Harvey, D. (2000). Modern analytical chemistry. McGraw-Hill.
16. McMurry, J. (2008). Química orgánica (7.^a ed.). Cengage Learning.
17. Meléndez López, A. L. [Adriana L. Meléndez López]. (23 de septiembre de 2021). *Obtención de un espectro infrarrojo mediante la técnica ATR-FT* [Video]. YouTube. <https://youtu.be/HpOOhjSm870?si=O59p4ANO9fS6qWL>
18. Meléndez López, A. L. [Adriana L. Meléndez López]. (19 de abril de 2021a). *Titulación ácido – base: determinación de ácido cítrico en limón y ácido acético en vinagre*. [Video]. YouTube. <https://youtu.be/Zn8y-TC8py0?si=avW8cJG07456yWAQ>
19. Meléndez López, A. L. [Adriana L. Meléndez López]. (4 de mayo de 2021b). *Titulación potenciométrica: determinación de la concentración de ácido acético en vinagre*. [Video]. YouTube. https://youtu.be/JnWg8Rpu_mY
20. Morrison, R. T., y Boyd, R. N. (1998). Química orgánica (5.^a ed.). Pearson Educación.

21. Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S., y Vyvyan, J. R. (2009). Introduction to Spectroscopy (4.^a ed.). Cengage Learning.
22. Robinson, K. A., y Robinson, J. F. (2001). Análisis instrumental. Pearson Educación.
23. Secretaría del Trabajo y Previsión Social. (2015, 9 de octubre). *Norma Oficial Mexicana NOM-018-STPS-2015, Sistema armonizado para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas peligrosas en los centros de trabajo*. Diario Oficial de la Federación.
24. Secretaría de Salud. (2004). Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos (8.^a ed.).
25. Silverstein, R. M., Bassler, G. C., y Morrill, T. C. (1991). Spectrometric identification of organic compounds (5.^a ed.). John Wiley y Sons.
26. Skoog, D. A., y West, D. M. (1986). Introducción a la química analítica. Editorial Reverté.
27. Skoog, D. A., Holler, F. J., y Crouch, S. R. (2008). Principios de análisis instrumental (6.^a ed.). Cengage Learning.
28. Solomons, T. W. G. (1997). Fundamentals of organic chemistry (5.^a ed.). John Wiley y Sons.
29. Speight, J. G. (2015). Handbook of petroleum product analysis (2.^a ed.). John Wiley y Sons.
30. The RRUFF Project. Database of Raman, X-ray, Infrared, and Chemistry of Minerals. Recuperado de <https://rruff.info/>
31. Valencia, P. G. A., y Martínez, A. (2001). Guía para el reconocimiento de drogas vegetales por cromatografía en capa fina. Universidad de Antioquia.
32. Vogel, A. I. (1989). Quantitative chemical analysis (5.^a ed.). Longman Scientific y Technical.
33. Wade, L. G. (2017). Química Orgánica (9.^a ed.). Pearson Educación.
34. Willard, H. H., Merritt, L. L., Dean, J. A., y Settle, F. A. (1991). Métodos instrumentales de análisis. Grupo Editorial Iberoamérica

Créditos de elementos gráficos

Elemento y ubicación	Autoría
Ilustración de portada	M. F. García Hurtado y J. A. Cruz Castañeda
Pictogramas de seguridad (p. 7)	J. A. Cruz Castañeda
Material para disoluciones (p. 10)	J. A. Reyes Alcántara
Líneas de aforo (p. 13)	M. F. García Hurtado
Indicadores de pH (p. 15)	J. A. Cruz Castañeda y A. Negrón Mendoza
Dispositivo de valoración (p. 18)	M. F. García Hurtado
Sistema de microtitulación (p. 19)	J. A. Reyes Alcántara
Curva de calibración (p. 22)	A. L. Meléndez López
Espectro de clorofilas (p. 28)	J. A. Cruz Castañeda
Equipo Soxhlet (p. 31)	J. A. Reyes Alcántara
Espectrómetro ATR-FTIR (p. 33)	M. F. García Hurtado
Espectro ácido succínico (p. 34)	A. L. Meléndez López
Mecanismo esterificación (p. 39)	M. F. García Hurtado
Sistema a reflujo (p. 42)	J. A. Reyes Alcántara
Embudo de separación (p. 43)	M. F. García Hurtado
Cromatoplaça UV (p. 46)	A. L. Meléndez López
Cámara de elución (p. 49)	J. A. Cruz Castañeda
Cromatógrafo de gases-FID (p. 53)	M. F. García Hurtado