

**UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA**  
**ESCUELA DE QUÍMICA**



**“DISEÑO Y MONTAJE DE UN SISTEMA COLORIMÉTRICO DE BAJO COSTO  
Y SU APLICACIÓN EN LA DETERMINACIÓN DE HIERRO CON 1,10-  
FENANTROLINA”**

TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR:  
**LUIS ARTURO UZQUIANO ESCAMILLA**

PARA OPTAR AL GRADO DE:  
**LICENCIADO EN CIENCIAS QUÍMICAS**

CIUDAD UNIVERSITARIA, SAN SALVADOR, NOVIEMBRE DE 2018

**UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA**  
**ESCUELA DE QUÍMICA**



**“DISEÑO Y MONTAJE DE UN SISTEMA COLORIMÉTRICO DE BAJO COSTO  
Y SU APLICACIÓN EN LA DETERMINACIÓN DE HIERRO CON 1,10-  
FENANTROLINA”**

**TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR:  
LUIS ARTURO UZQUIANO ESCAMILLA**

**PARA OPTAR AL GRADO DE:  
LICENCIADO EN CIENCIAS QUÍMICAS**

**CIUDAD UNIVERSITARIA, SAN SALVADOR, NOVIEMBRE DE 2018**

**UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA**  
**ESCUELA DE QUÍMICA**

**“DISEÑO Y MONTAJE DE UN SISTEMA COLORIMÉTRICO DE BAJO COSTO  
Y SU APLICACIÓN EN LA DETERMINACIÓN DE HIERRO CON 1,10-  
FENANTROLINA.”.**

**TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR:**  
**LUIS ARTURO UZQUIANO ESCAMILLA**

**PARA OPTAR AL GRADO DE:**  
**LICENCIADO EN CIENCIAS QUÍMICAS**

**ASESOR:**  
**DR. NÉSTOR GUILLERMO ORELLANA VELADO**

**CIUDAD UNIVERSITARIA, SAN SALVADOR, NOVIEMBRE DE 2018**

**UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR**

RECTOR

**MSC. ROGER ARMANDO ARIAS ALVARADO**

SECRETARIO GENERAL

**LIC. CRISTÓBAL HERNÁN RÍOS BENÍTEZ**

FISCAL GENERAL

**LIC. RAFAEL HUMBERTO PEÑA MARÍN**

**FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA**

DECANO

**LIC. MAURICIO HERNÁN LOVO**

SECRETARIA

**LIC. MELANY HERRERA TURCIOS**

DIRECTOR DE LA ESCUELA DE QUÍMICA

**DR. ALEX ADONAI OSORIO LANDAVERDE**

## **AGRADECIMIENTOS**

A todos los que, de alguna u otra forma, directa o indirectamente, contribuyeron en la realización de este trabajo de graduación y a mi formación profesional en general.

Gracias.

# I. ÍNDICE DE CONTENIDO

I.	ÍNDICE DE CONTENIDO .....	i
II.	ÍNDICE DE TABLAS .....	ii
III.	ÍNDICE DE FIGURAS.....	iii
1	RESUMEN.....	1
2	INTRODUCCIÓN .....	2
3	MARCO TEÓRICO.....	3
3.1	Medida de la absorción de la radiación electromagnética .....	3
3.1.1	Absorción de la radiación .....	3
3.1.2	Medida de transmitancia y de la absorbancia .....	4
3.1.3	Ley de Beer-Lambert. ....	5
3.1.4	Uso de estándares discretos.....	7
3.2	Diseños generales de instrumentos ópticos.....	8
3.3	Colorímetros.....	9
3.4	Modelo de color .....	10
3.4.1	Modelo de color RGB .....	11
3.5	Determinación colorimétrica de hierro con 1,10-Fenantrolina .....	12
4	METODOLOGÍA .....	13
4.1	Diseño del sistema colorimétrico. ....	13
4.1.1	Materiales y equipo .....	15
4.2	Diseño de la aplicación Android. ....	15
4.3	Validación del método para determinación de hierro con 1,10-Fenantrolina.....	21
5	ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS .....	23
5.1	Resultados experimentales iniciales con $\text{KMnO}_4$ . ....	23
5.2	Determinación de hierro con 1,10-fenantrolina .....	24
5.2.1	Resultados experimentales iniciales con 1,10-fenantrolina .....	24
5.2.2	Parámetros de validación .....	25
5.2.3	Comparación entre equipos.....	32
6	CONCLUSIONES .....	34
7	RECOMENDACIONES .....	35
8	BIBLIOGRAFÍA .....	36

## II. ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Resultados iniciales del análisis de disoluciones de permanganato de potasio.	23
Tabla 2: Resumen de los datos iniciales obtenidos con el método de 1,10-fenantrolina. Se presentan porcentajes de error calculados con base en la concentración calculada por ambos equipos.....	24
Tabla 3: Lecturas de absorbancia por sextuplicado de los puntos de la curva de calibración obtenidos con el espectrofotómetro UV-1700.....	25
Tabla 4: Datos de las curvas de calibración obtenidos con el espectrofotómetro UV-1700.....	25
Tabla 5: Resultados obtenidos al analizar la disolución de referencia 10 veces con el espectrofotómetro UV-1700.....	26
Tabla 6: Resultados obtenidos al analizar el blanco 10 veces con el espectrofotómetro UV-1700.....	26
Tabla 7: Lecturas de absorbancia por sextuplicado de los puntos de la curva de calibración obtenidos con el sistema colorimétrico.....	27
Tabla 8: Datos de las curvas de calibración obtenidos con el sistema colorimétrico.....	27
Tabla 9: Resultados obtenidos al analizar la disolución de referencia 10 veces con el sistema colorimétrico.....	28
Tabla 10: Resultados obtenidos al analizar el blanco 10 veces con el sistema colorimétrico.....	28
Tabla 11: Resumen de los resultados experimentales obtenidos con ambos equipos.....	29

### III. ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Proceso de excitación.....	3
Figura 2: Atenuación de un haz de radiación mediante una solución absorbente..	6
Figura 3: Componentes de diversos tipos de espectroscopia óptica por absorción.....	9
Figura 4: Julius Nessler (1827-1905) .....	9
Figura 5: Gradilla de tubos Nessler 1940. ....	9
Figura 6: Esquematación de los sistemas de color RGB y CMYK. ....	11
Figura 7: Diagrama general del diseño del sistema colorimétrico. ....	13
Figura 8: Diagrama general de medidas frontal y superior del sistema colorimétrico. ....	13
Figura 9: Imagen interna de la primera versión del equipo. ....	14
Figura 10: Imagen interna de la versión final del equipo. ....	14
Figura 11: Diagrama general de funcionamiento de la aplicación Android.....	16
Figura 12: Paso 1. Pantalla inicial de la aplicación. ....	16
Figura 13: Paso 1.1. La aplicación muestra en una ventana el valor de la intensidad.....	17
Figura 14: Paso 2. La fotografía del blanco se muestra en pantalla..	17
Figura 15: Paso 3.1. La fotografía del segundo punto de la curva de calibración se muestra en pantalla. ....	18
Figura 16: Paso 3.1. La fotografía del segundo punto de la curva de calibración se muestra en pantalla. ....	19
Figura 17: Paso 5. Pantalla de análisis de datos mediante regresión lineal. ....	20
Figura 18: Paso 5.1. Pantalla de análisis de datos mediante regresión lineal mostrando gráfica y parámetros de regresión. ....	20
Figura 19: Ejemplo que muestra el área analizada de las fotografías para generar la curva de calibración. ....	24
Figura 20: Curva de calibración para el método de 1,10-fenantrolina utilizando el espectrofotómetro UV-1700.....	26
Figura 21: Curva de calibración para el método de 1,10-fenantrolina utilizando el sistema colorimétrico.....	28
Figura 22: Gráfica de comparación de equipos. En el eje x los resultados del sistema colorimétrico y en el eje y los del UV-1700.....	33



# 1 RESUMEN

El presente trabajo de graduación demuestra el alto índice de factibilidad que tiene utilizar un teléfono inteligente como parte principal de un sistema colorimétrico portable y de bajo costo para la determinación colorimétrica de diferentes sustancias, específicamente, hierro, mediante su reacción con 1,10-fenantrolina.

Se investigó de manera satisfactoria la relación entre la concentración del complejo fenantrolina-hierro y el valor de absorbancia obtenida calculando intensidad a partir de datos del modelo de color RGB. Estos datos RGB son extraídos de una fotografía mediante una aplicación Android diseñada especialmente para registrarlos y analizarlos. Mediante esta aplicación se puede estimar la cantidad de hierro, en mg/L, presente en una muestra acuosa.

Los resultados obtenidos con el sistema colorimétrico son comparados con los obtenidos utilizando un espectrofotómetro convencional, que se usa comúnmente en el laboratorio para la cuantificación colorimétrica de un analito de interés en una muestra desconocida midiendo su absorbancia a una longitud de onda específica.

Los datos de los parámetros de validación determinados para el sistema colorimétrico demuestran el alto potencial que tiene utilizar este dispositivo para determinaciones colorimétricas.

Debido a la practicidad, portabilidad y bajo costo, ya antes mencionados, se tiene la visión de promover mediante este, diversos tipos de investigaciones analíticas.

## 2 INTRODUCCIÓN

Uno de los problemas más importantes para la humanidad en la actualidad es la contaminación ambiental, en especial la de los mantos acuíferos. Las especies tóxicas que con mayor frecuencia son encontradas en ríos y lagos son los metales pesados (Y. Reyes, 2016). Sin embargo, los equipos comerciales para su detección suelen tener precios muy elevados, es entonces cuando surge la necesidad de generar alternativas de menor costo que puedan utilizarse para la detección y cuantificación de metales contaminantes entre los cuales se pueden mencionar arsénico, cadmio, hierro, plomo y mercurio.

La colorimetría se ha caracterizado por ser una de las técnicas más simples para la cuantificación de metales dada la tendencia de estas especies químicas por formar complejos coloreados. El colorímetro clásico es un instrumento para medir la intensidad de un color, usualmente contrastándolo visualmente con un estándar de algún tipo (R. Bud, 1998). Si bien hay colorímetros (que también pueden llamarse tintómetros) diseñados para medir y estandarizar los colores de diferentes tipos de cosas tales como fuentes de luz, pinturas, tintes y aceites, para el químico promedio el término se refiere usualmente a un instrumento usado para determinar la concentración de especies coloreadas en disolución, comparando su intensidad de color con la de una disolución de concentración conocida.

Históricamente se había utilizado el ojo humano como detector del sistema colorimétrico (N. Ohta, 2005). Actualmente los colorímetros utilizan tubos fotomultiplicadores y fotodiodos de silicio especiales, los cuales se excitan al incidir fotones con energía específica sobre su superficie y liberan electrones que luego son cuantificados para obtener una señal. En el presente trabajo de graduación se plantea un sistema colorimétrico de bajo costo, utilizando la cámara de un teléfono inteligente para detectar la potencia de luz incidente luego de pasar a través de una disolución coloreada mediante la toma de una imagen fotográfica. El sistema se completa con una aplicación Android, mediante la cual la imagen es analizada y luego es transformada en un valor de absorbancia.

### 3 MARCO TEÓRICO

#### 3.1 Medida de la absorción de la radiación electromagnética

Es en la química analítica donde las medidas de la absorción de radiación en el rango ultra violeta y visible se vuelven muy útiles para el análisis cuantitativo de diferentes especies, desde metales u otros elementos, hasta moléculas orgánicas relativamente complejas.

##### 3.1.1 Absorción de la radiación (D. Skoog, 2008)

Cuando se hace pasar radiación electromagnética a través de una sustancia, la radiación en ciertas frecuencias sufre una pérdida de intensidad debido al fenómeno de *absorción*, donde la energía es transferida a los átomos, iones o moléculas que conforman la especie absorbente. La absorción impulsa a estas partículas desde su estado normal a temperatura ambiente, o estado fundamental, a uno o más estados excitados de energía superior, como se muestra en la Figura 1.

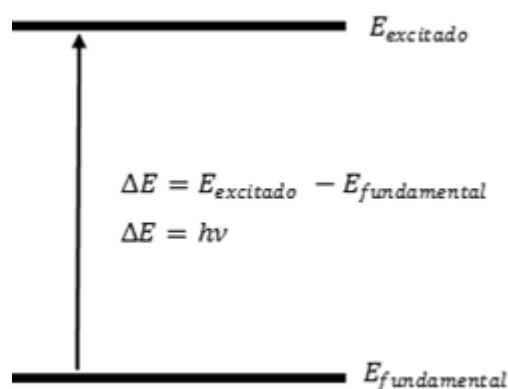


Figura 1: Proceso de excitación.

En el caso de la espectroscopía ultravioleta y visible, las transiciones que resultan en la absorción de radiación electromagnética en esta región del espectro (190-800nm) son transiciones entre niveles de energía electrónica. Cuando una molécula absorbe energía, un electrón es promovido de un orbital ocupado a un orbital desocupado de mayor energía potencial. Generalmente, la transición más probable es desde el orbital molecular ocupado más alto (HOMO) hacia el orbital molecular desocupado más bajo (LUMO).

##### 3.1.1.1 Absorción atómica

El paso de radiación policromática continua, ultravioleta o visible, a través de un medio que consta de partículas monoatómicas, como mercurio y sodio gaseosos, origina la absorción de solo unas frecuencias muy bien definidas. La excitación ocurre solo mediante un proceso electrónico en el cual uno o más de los electrones del átomo son llevados a un nivel superior de energía. Por ejemplo, el vapor de sodio manifiesta dos picos de absorción, nítidos y muy cercanos en la región amarilla del espectro visible (589.0 y 589.6 nm).

### 3.1.1.2 Absorción molecular

Los espectros de absorción de moléculas poliatómicas, en particular en el estado condensado, son en gran medida más complejos que los espectros atómicos porque, en general, la cantidad de estados de energía de las moléculas es enorme cuando se compara con la cantidad de estados de energía de los átomos aislados. La energía  $E$  asociada con las bandas de una molécula está formada por tres componentes. Es decir,

$$E = E_{\text{electrónica}} + E_{\text{vibracional}} + E_{\text{rotacional}} \quad (1)$$

donde  $E_{\text{electrónica}}$  representa la energía electrónica de la molécula que surge de los estados energéticos de sus diversos electrones de enlace. El segundo término de la derecha se refiere a la energía total de la multitud de vibraciones interatómicas que se presentan en la especie molecular. En general, una molécula posee muchos más niveles de energía vibracional cuantizados que niveles electrónicos. Por último,  $E_{\text{rotacional}}$  es la energía que ocasionan los diferentes movimientos de rotación dentro de una molécula. Otra vez, la cantidad de estados de rotación es mayor que la cantidad de estados vibracionales. Por consiguiente, para cada estado energético electrónico de una molécula hay por lo regular varios estados vibracionales posibles. Para cada uno de ellos, a su vez, son posibles numerosos estados rotacionales. Por tanto, la cantidad de niveles de energía posibles para una molécula es de varios órdenes de magnitud mayor que la cantidad de niveles energéticos posibles de una partícula atómica.

### Compuestos coloreados

Una de las propiedades más llamativas que se ha observado desde el principio de los casi doscientos años de trabajo con compuestos de coordinación, es la gran variedad de colores brillantes e intensos que suelen presentar. El color es el resultado de la absorción de una parte del espectro visible. Las frecuencias que no se absorben se reflejan o se transmiten desde la sustancia hasta nuestros ojos y producen esa sensación que llamamos color. (Rodgers, 1995)

### 3.1.2 Medida de transmitancia y de la absorbancia

Para comprender cómo cuantificar la radiación absorbida por una disolución de interés, tenemos que definir dos términos principales, transmitancia, que indica la cantidad de radiación que emerge luego de pasar a través de la disolución y absorbancia, que se refiere a la cantidad de radiación que es absorbida por la misma.

En las mediciones de absorbancia y transmitancia se suelen emplear cubetas de distintos materiales como vidrio y cuarzo. Al pasar a través de la cubeta la radiación sufre pérdida de potencia debido al efecto de reflexión y dispersión, lo que puede significar errores al querer medir la absorbancia del analito, esto es producto de la interacción de la radiación electromagnética con la superficie de la cubeta y con las moléculas que componen la sustancia en disolución (D. Skoog, 2008).

Para compensar todos los efectos de pérdida, la potencia de la luz transmitida por la disolución se compara, generalmente, con la potencia del haz transmitido por una cubeta idéntica que contiene la disolución utilizada como blanco, generalmente se utiliza una disolución que contiene todos los reactivos involucrados en el método, sin incluir el analito. Con las ecuaciones 2 y 3 se obtienen la transmitancia y absorbancia experimentales que se aproximan a la transmitancia y absorbancia verdaderas.

$$T = \frac{P_{disolución}}{P_{blanco}} = \frac{P}{P_0} \quad (2)$$

$$A = -\log T = \log \frac{P_{blanco}}{P_{disolución}} = \log \frac{P_0}{P} \quad (3)$$

Los términos  $P_0$  y  $P$ , se refieren a la potencia de la radiación después de pasar por cubetas que contienen el blanco y el analito, respectivamente.

### 3.1.3 Ley de Beer-Lambert.

La teoría básica de la colorimetría es atribuida al trabajo de los físicos alemanes Johann Heinrich Lambert y August Beer (D. R. Malinin, 1961). En 1760, a Lambert se le atribuyó la deducción de cómo la intensidad observada de una fuente de luz cambiaba cuando se veía a través de materiales transparentes de grosor variado, aunque en realidad estaba citando el trabajo anterior del físico francés Pierre Bouguer, quien había establecido la relación necesaria en el año 1729. En 1852, Beer exploró un poco más sobre cómo la intensidad de la luz cambiaba cuando se observaba a través de una columna de líquido coloreado como una función de la concentración del soluto responsable por el color, a pesar de que una vez más,

virtualmente los mismos resultados fueron publicados unos meses después por el francés, Félix Bernard (Jensen, 2014). Sin importar las contribuciones de Bouguer y Bernard, los resultados combinados de estas investigaciones son ahora conocidos como la ley de Beer-Lambert y puede expresarse matemáticamente como:

$$A = \log \frac{P_0}{P} = \epsilon bc \quad (4)$$

Donde  $c$  es la concentración de la disolución en moles por litro,  $b$  es la longitud del paso óptico en centímetros y  $\epsilon$  es una constante de proporcionalidad conocida, como el coeficiente absorptividad molar y varía de una disolución coloreada a otra, con la temperatura y con la longitud de onda de la luz, como se ve en la Figura 2.

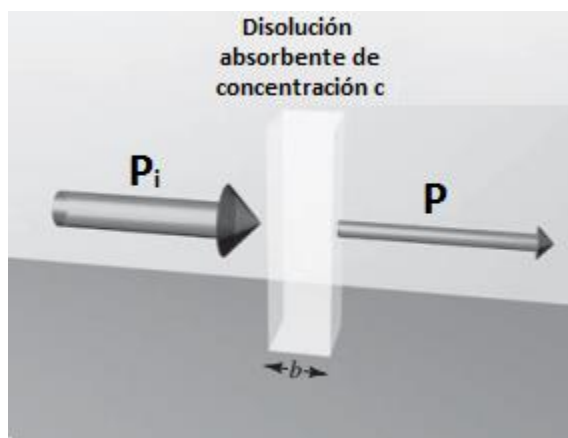


Figura 2: Atenuación de un haz de radiación mediante una solución absorbente. La flecha más grande en el rayo incidente indica que hay una energía radiante superior que se transmite por la solución. El paso óptico es  $b$  y la concentración es  $c$ .

Sin embargo, se debe enfatizar que hubo químicos analíticos que empezaron a explorar empíricamente la posibilidad de una correlación entre la intensidad de una disolución coloreada y su concentración mucho antes del trabajo de Beer (Jensen, 2014).

### 3.1.3.1 Limitaciones de la Ley de Beer-Lambert (D. Skoog, 2008)

Se han encontrado pocas excepciones a la generalización de que la absorbancia está relacionada en forma lineal con la longitud de la trayectoria. Por otra parte, se han encontrado desviaciones frecuentes de la proporcionalidad directa entre la absorbancia medida y la concentración cuando  $b$  es constante. Algunas de estas desviaciones, llamadas desviaciones

reales, son fundamentales y representan limitaciones propias de la ley. Otras resultan de la forma en que se realizan las mediciones de absorbancia (desviaciones instrumentales) o son consecuencia de cambios químicos que ocurren cuando se modifica la concentración (desviaciones químicas). En este trabajo de investigación nos interesa abordar las desviaciones instrumentales principales.

- **Radiación policromática**

La ley de Beer sólo se cumple en forma rigurosa cuando las mediciones se efectúan con radiación monocromática. En la práctica, las fuentes policromáticas que tienen una distribución continua de longitudes de onda se usan junto con una red o un filtro para aislar una banda más o menos simétrica de longitudes de onda que rodean a la longitud de onda que se quiere usar. En nuestro sistema colorimétrico la fuente de radiación es un LED que emite luz blanca (policromática), esto dado su bajo costo y fácil acceso. Gracias al tipo de detector, el sistema está diseñado de tal manera que no necesita selector de longitud de onda para su funcionamiento.

- **Radiación parásita**

En las configuraciones convencionales, por lo regular, la radiación que emerge del monocromador está contaminada con pequeñas cantidades de radiación dispersa o parásita llamada luz parásita, y se define como la que proviene de un instrumento que está fuera de la banda de longitud de onda seleccionada para la determinación. Con frecuencia, esta radiación parásita es resultado de la dispersión y reflexión desde superficies de redes, lentes o espejos, filtros y ventanas. A menudo, la longitud de onda de la radiación parásita difiere de manera sustancial de la radiación principal y, además, podría no haber atravesado la muestra. Nuestro sistema colorimétrico no cuenta con monocromador, sin embargo, las paredes del interior son negras para poder reducir la reflexión, también es crucial mantener el interior del instrumento en aislamiento total con respecto a la luz exterior.

### **3.1.4 Uso de estándares discretos.**

La manera más simple de determinar la concentración de un soluto coloreado es comparar su intensidad de color con la de un estándar de concentración conocida con un paso óptico

constante  $b$  y una potencia inicial  $P_0$ . Si aplicamos la Ecuación 4, por separado a la disolución de concentración desconocida ( $u$ ), a la disolución estándar ( $s$ ), restamos una de la otra para cancelar  $P_0$  y calculamos el logaritmo de  $P_u/P_s$ , se obtiene el siguiente resultado:

$$\log\left(\frac{P_u}{P_s}\right) = \epsilon b \Delta c \quad (5)$$

Cuando las potencias del desconocido y del estándar son iguales, o  $P_u/P_s = 1$  y por tanto  $\log(P_u/P_s) = 0$ , entonces la ecuación 5 se reduce a:

$$0 = \epsilon b \Delta c \quad (6)$$

Y por tanto:

$$0 = \Delta c, \text{ y también, } c_u = c_s \quad (7)$$

El método más simple para aplicar este resultado es preparar una serie de disoluciones estándar, donde cada una difiere de la siguiente por una cantidad finita de incremento de concentración, y entonces comparar sus colores con la disolución de concentración desconocida.

### **3.2 DISEÑOS GENERALES DE INSTRUMENTOS ÓPTICOS**

Los instrumentos espectroscópicos típicos están compuestos por cinco componentes: 1) una fuente estable de energía radiante; 2) un recipiente transparente en donde se coloca la muestra; 3) un dispositivo que aísla una región restringida del espectro para efectuar las mediciones; 4) un detector de radiación que convierte la energía radiante en una señal eléctrica útil y 5) una unidad que procesa las señales y despliega resultados, la cual exhibe la señal que entrega el transductor en la escala de un medidor, una pantalla de computadora, un medidor digital u otro dispositivo de registro. En la Figura 3 se ilustra un esquema tradicional de un equipo de espectroscopia óptica por absorción. (D. Skoog, 2008)



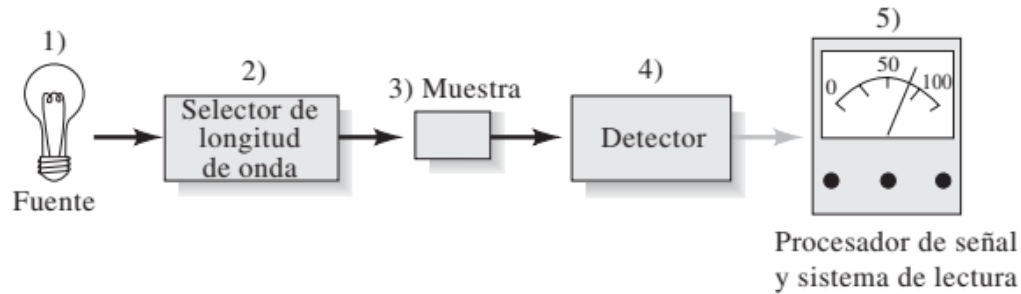


Figura 3: Componentes de diversos tipos de espectroscopia óptica por absorción.

### 3.3 Colorímetros.

A pesar que este no es uno de los ejemplos más recientes de la aplicación de la colorimetría, la prueba colorimétrica más comúnmente asociada con este procedimiento de comparación de colores fue desarrollado en 1856 por el químico-agrónomo alemán Julius Nessler, cuyo retrato se muestra en la Figura 4. Basado en el uso de una disolución de tetrayodomercurato (II) de potasio ( $K_2HgI_4$ ), también conocido como reactivo de Nessler, fue utilizado para medir y detectar coloriméricamente las cantidades de ion amonio y/o amoníaco presente en muestras de agua potable.



Figura 4: Julius Nessler (1827-1905)



Figura 5: Gradilla de tubos Nessler 1940.

Esto fue importante dado que la presencia de estas especies comúnmente indica que el agua había tenido contacto con algún tipo de material animal en descomposición y por tanto está contaminada. Aunque lo propuso primero G. E. Davis en 1873 en lugar de Nessler, para el inicio del siglo XX la mayoría de las casas distribuidoras de implementos químicos estaban vendiendo “tubos Nessler”, mostrados en la Figura 5, que estaban especialmente diseñados con secciones transversales uniformes, fondos ópticamente planos y pasos ópticos premarcados, acompañados de una

gradilla para tubos especiales con bases de vidrio blanco para mejorar la visibilidad del color (Jensen, 2014).

Los métodos visuales para la determinación de la intensidad de color tienen variaciones no controlables tales como la diferencia que puede existir entre cómo es percibido un color de persona en persona, falta de iluminación uniforme, efecto del ángulo de visión, entre otros; lo que lleva a obtener resultados subjetivos y no reproducibles. Actualmente los colorímetros comerciales utilizan tubos fotomultiplicadores y fotodiodos de silicio, que convierten los fotones en electrones y cuantifican los electrones para obtener una señal.

En los últimos años se han realizado estudios donde se proponen sistemas colorimétricos utilizando la cámara de un teléfono inteligente como detector para la determinación de proteínas, enzimas y carbohidratos (S. Dutta, 2016); pH y nitritos (N. Lopez, 2014); concentración de alcohol en saliva (Y. Jung, 2015), entre otros.

Los trabajos citados en el apartado anterior tienen en común el uso de un modelo de color para cuantificar la intensidad del color y luego obtener su absorbancia. En el caso de este proyecto se ha decidido utilizar, dada su simplicidad, el modelo de color RGB.

### **3.4 Modelo de color**

El ser humano siempre ha percibido el mundo a colores, pero no fue hasta las décadas de los 60 y 70's que se lograron obtener imágenes a color. Un modelo de color es un modelo matemático abstracto que define los colores como un grupo de números.

Existen dos tipos de sistemas de color, aditivos y sustractivos, mostrados en la figura 6. El aditivo se utiliza usualmente con aspectos relacionados con la luz, el sistema RGB es un ejemplo de estos, donde se mezclan tres fuentes de luz (rojo, verde y azul) a distintas longitudes de onda para formar los distintos colores. El sustractivo se utiliza comúnmente en pigmentos, por ejemplo, para reproducir en el papel toda una gama de colores, los cartuchos en las impresoras utilizan distintas proporciones de cian, magenta y amarillo, del sistema CMYK.

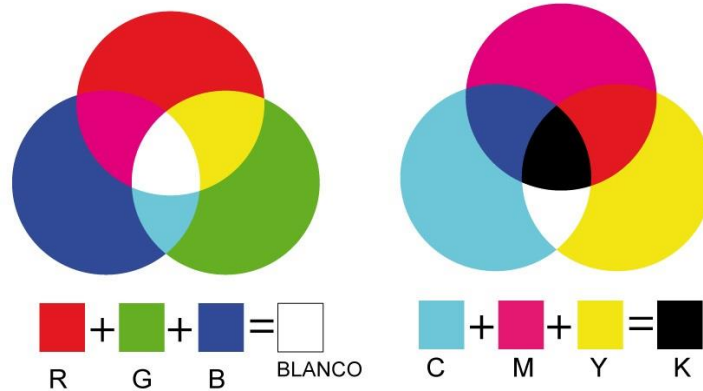


Figura 6: Esquematización de los sistemas de color RGB y CMYK.

### 3.4.1 Modelo de color RGB

El modelo de color RGB es un modelo aditivo, ya que utiliza rojo (R), verde (G) y Azul (B), mezclados de diferentes maneras para formar distintos tonos y matices. Este se puede entender como toda la variedad de colores que se pueden formar al mezclar rojo, verde y azul en distintas proporciones. Utilizar este modelo tiene buenos resultados ya que, si bien no exactamente, es muy similar a cómo se cree que el ojo humano interpreta los colores (N. Ohta, 2005).

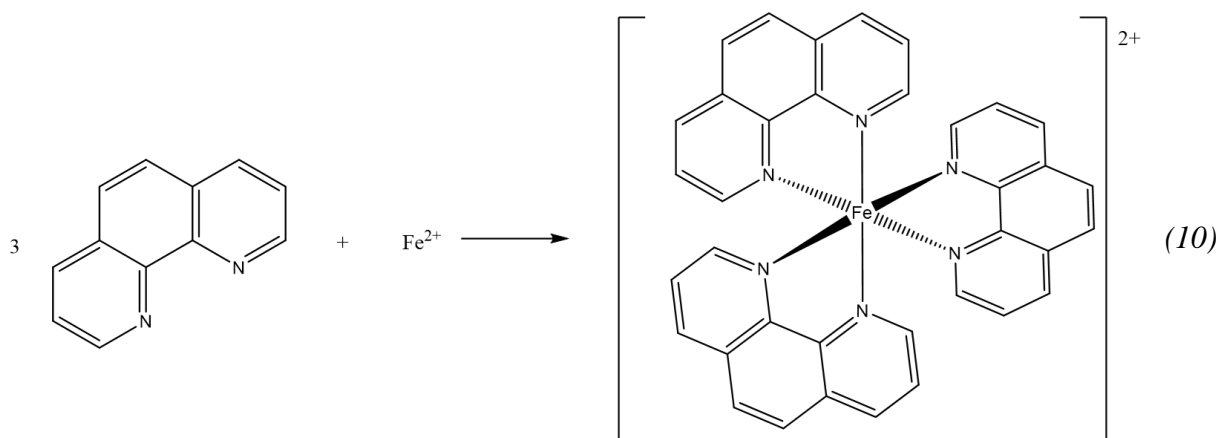
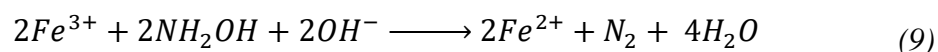
La principal función de este modelo, es el permitir mostrar los colores en aparatos electrónicos, donde su mayor aplicación es en los monitores de computadora, cámaras y televisores (R. Hunt, 2004).

Según este modelo, podemos decir entonces que la luz blanca como la percibimos es una combinación de rojo, verde y azul (colores primarios). Es por ello que, la intensidad de color se define como, el promedio de los valores numéricos de los colores primarios, según la siguiente ecuación (K. N. Plataniotis, 2000):

$$I = \frac{R + G + B}{3} \quad (8)$$

### 3.5 Determinación colorimétrica de hierro con 1,10-Fenantrolina

La determinación de hierro (II) mediante la formación de un compuesto de coordinación con 1,10-fenantrolina es una opción sumamente viable. Ya que el complejo formado es de un color rojo/naranja que tiene una constante de absorptividad molar de  $11,100 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$  a  $508 \text{ nm}$ . La estabilidad del complejo coloreado es elevada y no varía significativamente en un rango de pH de 2 a 9, no obstante, se agrega acetato de amonio para regular el pH a valores que estén dentro de ese rango. Es importante que todo el hierro presente tenga estado de oxidación de +2 por lo que se agrega cloruro de hidroxilamina como agente reductor previo a la formación de color (A. Underwood, 1989). Las ecuaciones de las reacciones químicas principalmente involucradas son las siguientes:



## 4 METODOLOGÍA

### 4.1 Diseño de la parte electrónica, óptica y estructura de soporte del sistema colorimétrico.

El sistema colorimétrico consta, de manera similar a lo reportado por S. Dutta. (S. Dutta, 2016), de un LED blanco como fuente de radiación, un lente para condensar la luz y una placa difusora de luz. Todo esto montado en una estructura de MDF (tablero de fibra de densidad media), que sirva de soporte tanto para los componentes mencionados como para el teléfono inteligente. El esquema general del diseño se muestra en la Figura 7, el diagrama de medidas de la estructura de soporte se muestra en la Figura 8 y la imagen de la primera versión del equipo se muestra en la Figura 9.

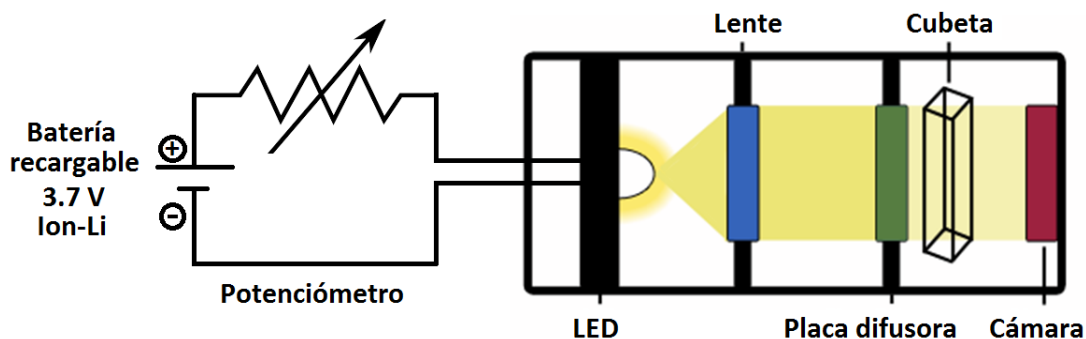


Figura 7: Diagrama general del diseño del sistema colorimétrico.

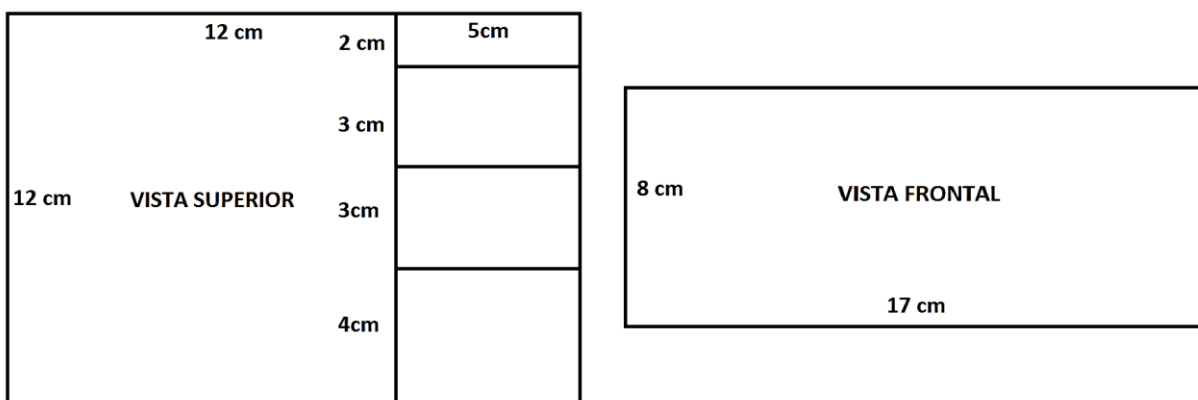
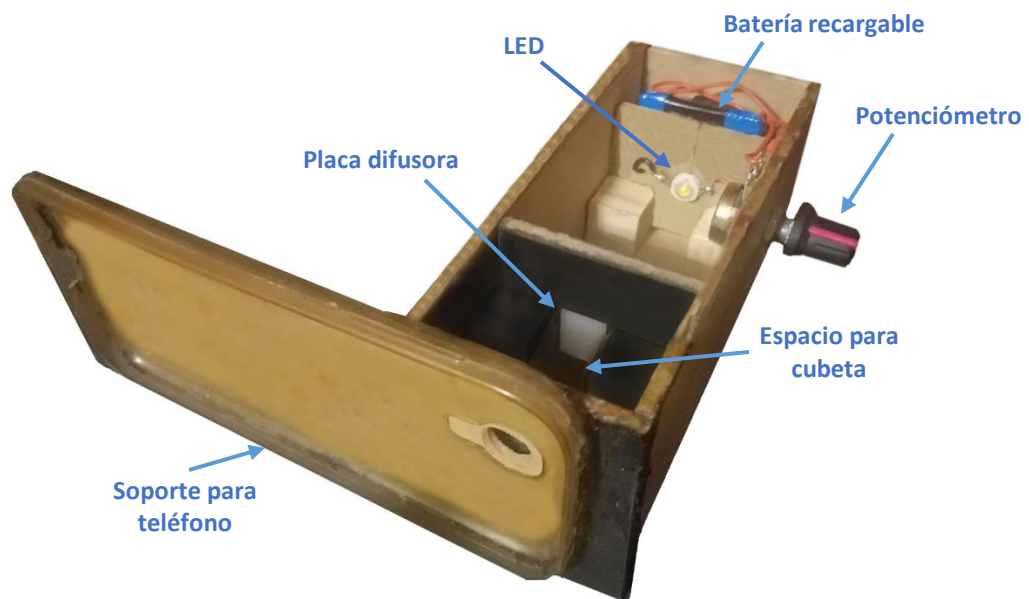


Figura 8: Diagrama general de medidas frontal y superior del sistema colorimétrico.



*Figura 9: Imagen interna de la primera versión del equipo.*

A medida que los análisis se fueron realizando, se notaron algunas fallas en el sistema colorimétrico, se hicieron diversos cambios menores, siendo el más significativo el retiro del lente. El que debía usarse según la referencia consultada (S. Dutta, 2016), es un lente plano convexo cuyo precio supera los \$25 y por ende, no cumplía con las características de ser de fácil acceso y de precio bajo, por estas razones se optó por utilizar un lente de puntero láser, con el cual, si bien se obtuvieron buenos resultados, estos no eran constantes, lo que se traducía en desviaciones estándar altas de las lecturas. La versión final el sistema colorimétrico, que se muestra en la figura 10, ya no cuenta con el lente instalado.



*Figura 10: Imagen interna de la versión final del equipo.*

### **4.1.1 Materiales y equipo**

#### **✓ Parte electrónica.**

Esta parte consta de un puerto USB utilizado para alimentar una batería recargable de Ion-Li 3.7V, un potenciómetro de 15 k $\Omega$ , para regular la intensidad de la luz emitida por el LED y un interruptor basculante pequeño. Para las conexiones entre partes se utilizó un soldador eléctrico, estaño y pasta fundente.

#### **✓ Parte óptica.**

La parte óptica consta de un diodo emisor de luz blanca como fuente de radiación y una placa difusora plástica utilizada para que la luz sea atenuada y difundida en área antes de ser detectada por la cámara del teléfono inteligente. También fue necesaria una cubeta para espectrofotometría visible que contiene la muestra a analizar.

#### **✓ Estructura de soporte.**

La estructura de soporte del sistema colorimétrico se construyó con MDF (tablero de fibra de densidad media). Se utilizó una sierra caladora, escuadra metálica, cinta métrica, abrazaderas para madera, taladro, brocas, pegamento para madera, pegamento de calidad industrial. Para el soporte específico del teléfono inteligente se adhirió un protector comercial flexible para Samsung Galaxy S4.

## **4.2 Diseño de la aplicación Android.**

La aplicación Android encargada de analizar la imagen tomada por la cámara, se diseñó en el entorno del sitio web MIT App Inventor 2 (<http://appinventor.mit.edu>). El sitio permite crear aplicaciones para sistema Android a usuarios con conocimientos de programación limitados. Si bien su simplicidad limita la variedad de las aplicaciones creadas, su interfaz gráfica y sumamente intuitiva, así como los distintos tutoriales que se pueden encontrar en la red, hacen de esta plataforma la ideal para llevar a cabo el diseño de la aplicación antes mencionada. El funcionamiento general de la aplicación se muestra en la Figura 11.

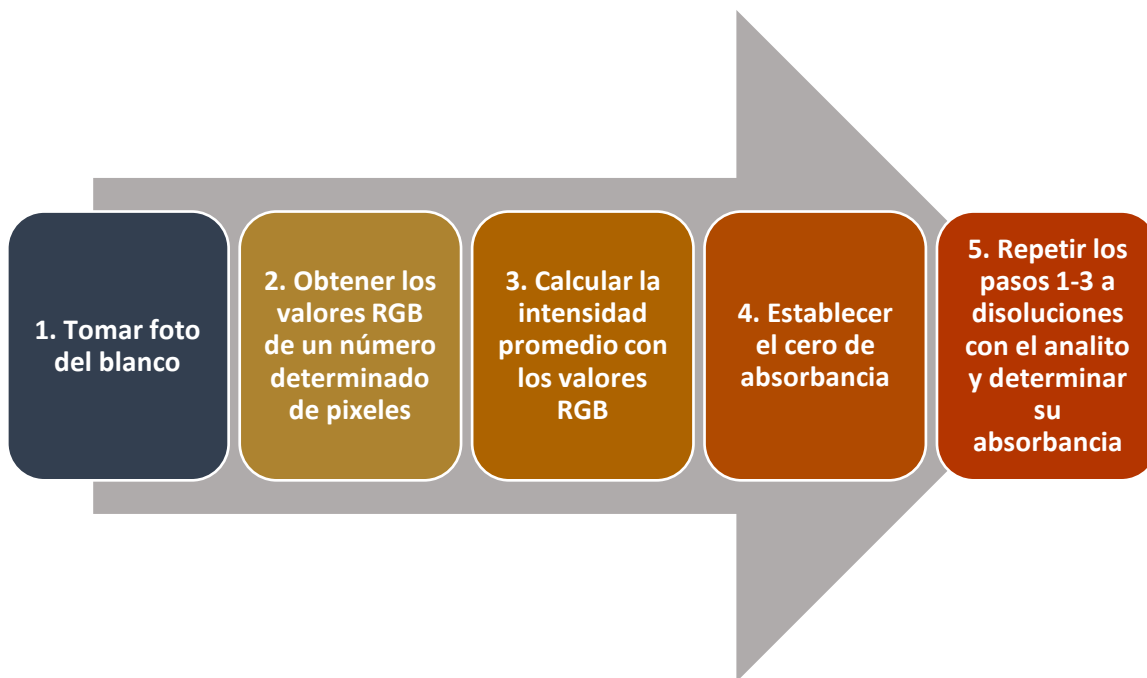


Figura 11: Diagrama general de funcionamiento de la aplicación Android del sistema colorimétrico.

**Paso 1 (Usuario):** Tomar una fotografía sin introducir la cubeta y con la compuerta cerrada.

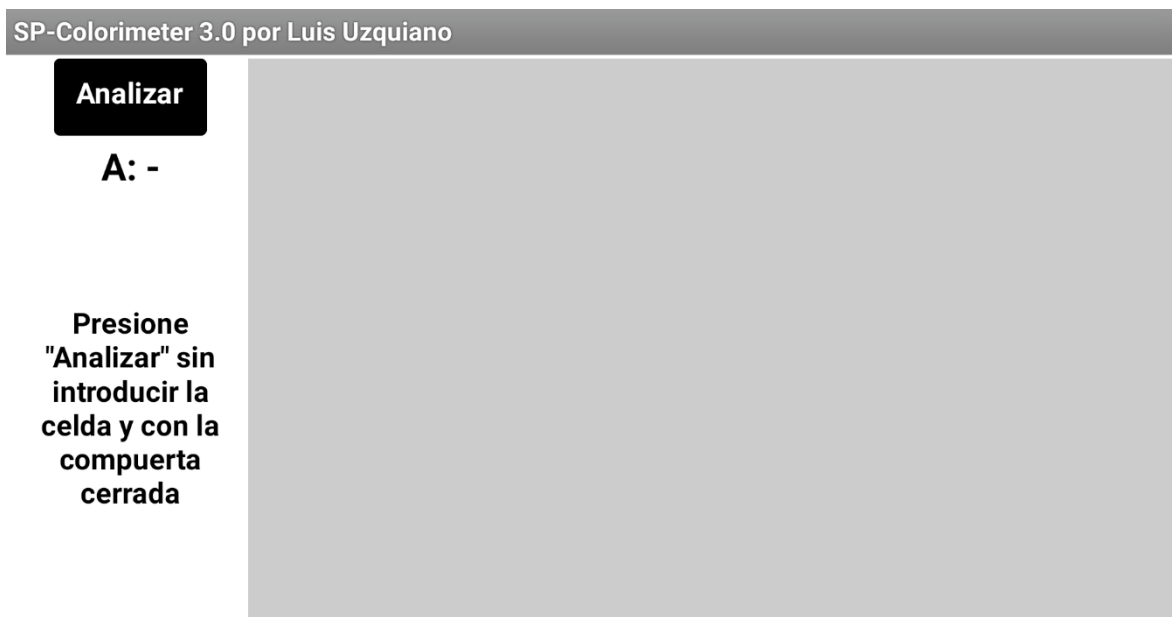


Figura 12: Paso 1. Pantalla inicial de la aplicación, donde al presionar “Analizar” se toma una fotografía para determinar la intensidad del LED.

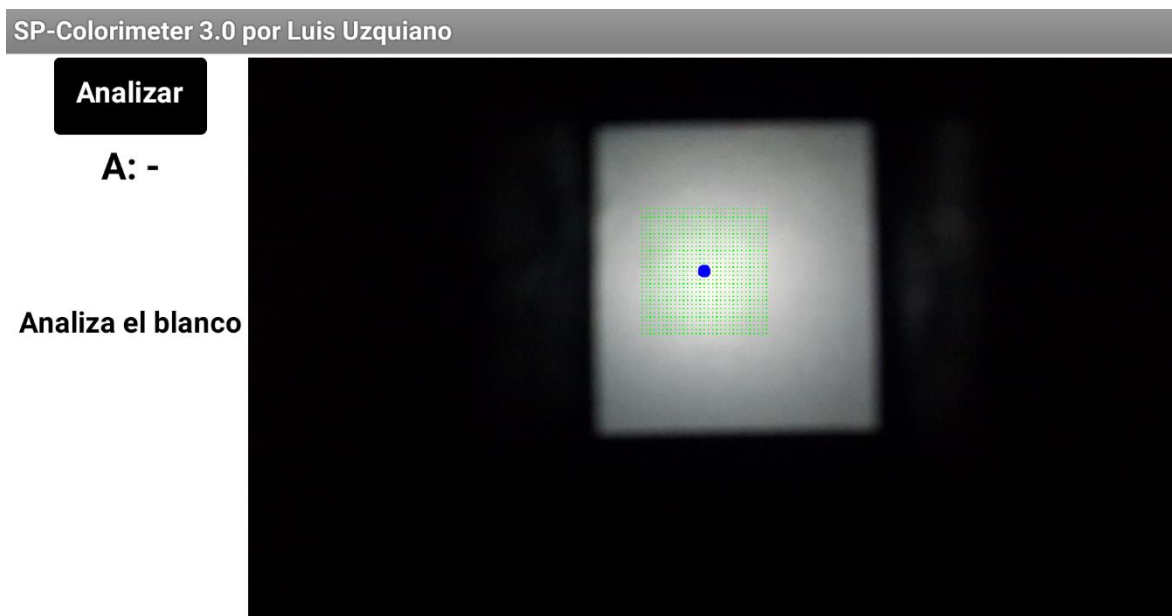


**Paso 1.1 (Aplicación):** La aplicación muestra la intensidad del LED según una escala propia de 0 a 10, donde el cero se ajustó con el mínimo de intensidad del LED y el 10 con el máximo de intensidad del LED, ajustándolo con el potenciómetro.



*Figura 13: Paso 1.1. La aplicación muestra en una ventana el valor de la intensidad.*

**Paso 2 (Usuario):** Se toma una fotografía de la celda con el blanco.



*Figura 14: Paso 2. La fotografía del blanco se muestra en pantalla. En verde se muestra el área analizada de la fotografía.*

**Paso 2.1 (Aplicación):** Se analiza un área definida de la imagen obteniendo los valores de los parámetros RGB de dicha área y se calcula un promedio de estos parámetros. El área es seleccionada de tal manera que contenga los pixeles con mayor intensidad de luz y la cantidad justa para obtener suficientes datos sin que el proceso tarde mucho tiempo.

**Paso 2.2 (Aplicación):** Utilizando los valores RGB, se calcula la intensidad calculando el promedio de los tres valores según la ecuación 8.

**Paso 2.3 (Aplicación):** Con la intensidad del blanco se establece el cero de absorbancia según la ecuación 3.

**Paso 3 (Usuario):** Se toma una fotografía de la celda con la disolución a determinar absorbancia.

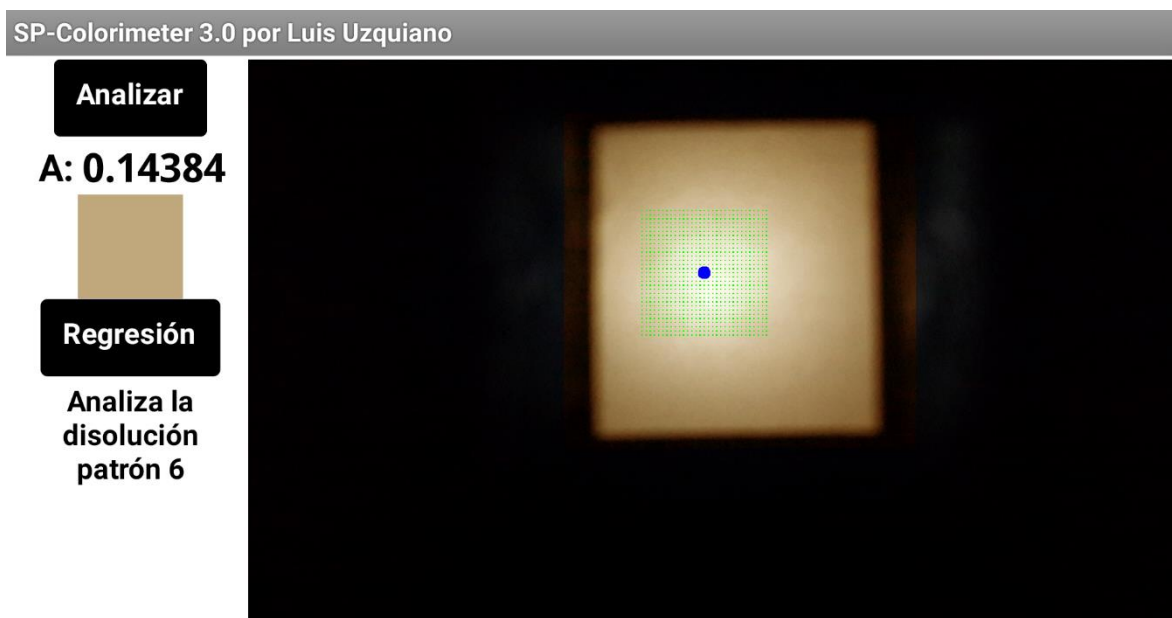
**Paso 3.1 (Aplicación):** La aplicación calcula la absorbancia de la disolución según la ecuación 3 y la muestra en pantalla.



*Figura 15: Paso 3.1. La fotografía del segundo punto de la curva de calibración se muestra en pantalla.*

**Paso 4 (Ambos):** Repetir el proceso hasta tener analizados 6 puntos para la curva incluyendo el blanco.

**Paso 4.1 (Aplicación):** Luego de analizar el sexto punto de la curva se activa un botón para realizar la regresión lineal.



*Figura 16: Paso 4.1. La fotografía del segundo punto de la curva de calibración se muestra en pantalla.*

**Paso 5 (Usuario):** Luego de presionar el botón *Regresión*, se muestra una nueva ventana donde se ingresan las concentraciones de las disoluciones estándar, las absorbancias se rellenan automáticamente en la tabla, luego presionar “Calcular”.

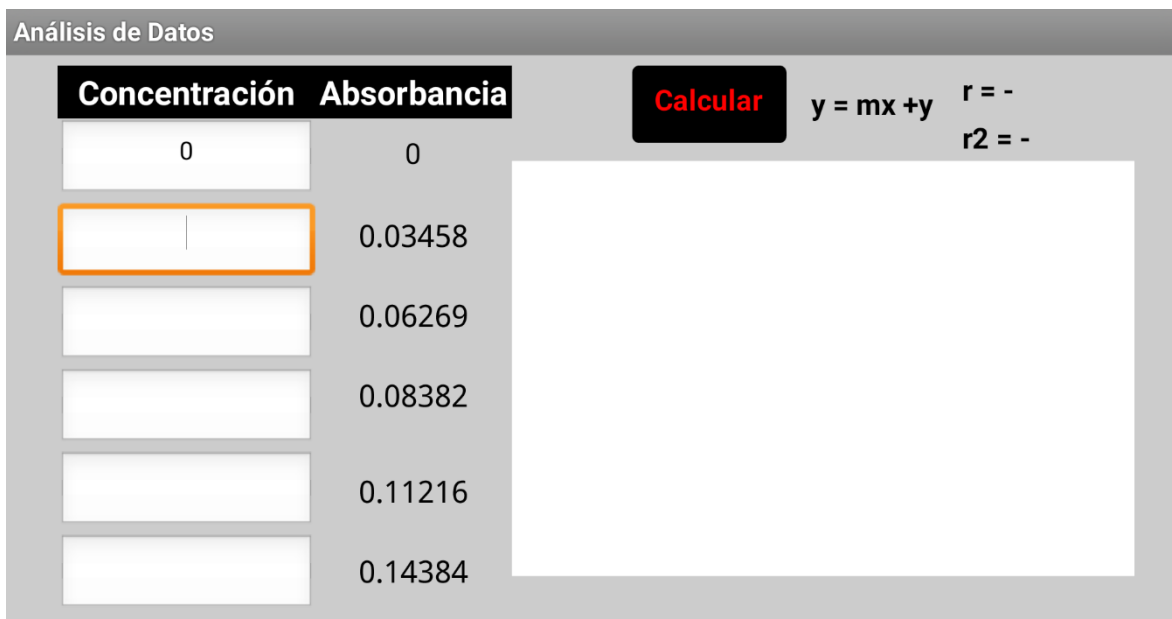


Figura 17: Paso 5. Pantalla de análisis de datos mediante regresión lineal.

**Paso 5.1 (Aplicación):** La aplicación realiza análisis de regresión lineal a los datos y presenta el gráfico, la ecuación, el coeficiente de correlación y determinación.

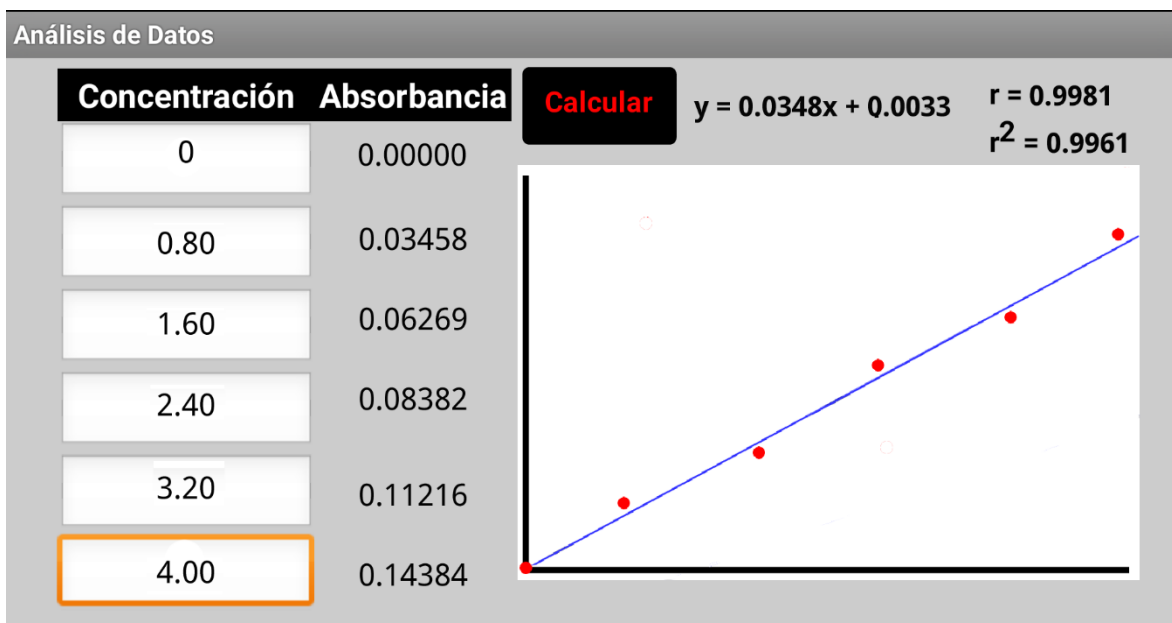


Figura 18: Paso 5.1. Pantalla de análisis de datos mediante regresión lineal mostrando gráfica y parámetros de regresión.

### 4.3 Validación del método para determinación de hierro con 1,10-Fenantrolina.

El método para la determinación de hierro con 1,10-Fenantrolina se resume a continuación (A. Underwood, 1989).

- **Curva de calibración:**

Preparar las disoluciones estándar agregando a balones de 25mL:

- 2.5 mL de 1,10-Fenantrolina 1%.
- 2 mL de acetato de sodio 10%
- 0.25 mL de Cloruro de hidroxilamina 10%
- 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 mL de disolución patrón de hierro 100 mg/L, para obtener concentraciones de 0, 0.4, 0.8, 1.6, 2.4, 3.2 y 4.0 mg/L

Esperar 10 min y medir las absorbancias de cada disolución patrón.

La curva de calibración que se utilizó para los cálculos de validación es el promedio de 6 curvas de calibración realizadas bajo las mismas condiciones.

Los parámetros de validación que se determinaron son (B. Magnusson, 2014):

- **Sensibilidad:** La sensibilidad se interpreta como el cambio en la respuesta de un equipo de medición relacionado con el cambio correspondiente de estímulo, o simplemente el gradiente de la curva de calibración, es decir, su pendiente. Por tanto, se analizará la pendiente de la curva de calibración.
- ✓ **Linealidad:** Se presentan los coeficientes de correlación lineal de la curva de calibración y se confirma correlación lineal mediante prueba t.
- ✓ **Límite de detección (LDD) y cuantificación (LDQ):** Se calcularon según las ecuaciones:

$$LDD = \frac{3.3\sigma}{S} \quad (11)$$

$$LDQ = \frac{10\sigma}{S} \quad (12)$$

Donde  $S$  es la pendiente de la curva de calibración realizada por sextuplicado y  $\sigma$  es la desviación estándar de diez mediciones de blanco.

- ✓ **Exactitud:** Se calculó como porcentaje de recobro aparente según la ecuación:

$$\%R = \frac{\bar{x}}{x_{ref}} \times 100 \quad (13)$$

Donde  $x_{ref}$  es la concentración de la disolución de referencia (2 mg/L) y  $\bar{x}$  es el promedio de la concentración calculada utilizando 10 lecturas de la misma disolución.

- ✓ **Precisión:** Se calculó como repetibilidad, analizando diez lecturas de la disolución de referencia (2 mg/L) y calculando la desviación estándar relativa porcentual según la ecuación:

$$\%DER = \frac{\sigma}{\bar{x}} \times 100 \quad (14)$$

Donde  $\bar{x}$  es el promedio de 10 lecturas de la disolución de referencia (2 mg/L) y  $\sigma$  es la desviación estándar de las mismas lecturas.

## 5 ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

A lo largo del desarrollo de la parte experimental del proyecto se obtuvieron múltiples y diversos tipos de resultados.

### 5.1 Resultados experimentales iniciales con $\text{KMnO}_4$ .

Luego de tener el sistema colorimétrico listo en su primera versión, para el primer análisis se realizó una curva de calibración utilizando disoluciones de permanganato de potasio con diferentes concentraciones en un rango de 190 a 1000 mg/L, esto para confirmar que con el equipo podían obtenerse respuestas lineales. También se analizó una muestra de concentración desconocida para comparar las calculadas con la respuesta tanto del sistema colorimétrico, como del espectrofotómetro UV-1700, los resultados obtenidos se muestran en la tabla 1.

Tabla 1: Resultados iniciales del análisis de disoluciones de permanganato de potasio.

Estándar	Concentración (mg/L)	Absorbancia	
		Colorímetro	UV-1700
Blanco	0.0	0.00000	0.000
1	191.2	0.04565	0.148
2	382.4	0.12378	0.320
4	764.8	0.25325	0.564
5	956.0	0.32185	0.698
Desconocido:		0.20501	0.492
Coeficiente de determinación ( $r^2$ ):		0.9972	0.9965
Concentración calculada (mg/L):		712.04	683.43
%Error:		4.2%	

Como muestra la tabla 1, el error de un equipo con respecto al otro fue de 4.2%; de igual manera, la linealidad de los datos fue bastante buena dado que el coeficiente de determinación era muy cercano a la unidad. Los buenos resultados dieron pie a realizar ensayos con un método analítico más elaborado y complejo como lo es la determinación de hierro con 1,10-fenantrolina.

## 5.2 Determinación de hierro con 1,10-fenantrolina

### 5.2.1 Resultados experimentales iniciales con 1,10-fenantrolina

Los resultados obtenidos con este método fueron muy variados, inicialmente estos no eran repetibles, se obtuvieron linealidades muy buenas y otras no tan buenas, también porcentajes de error entre equipos de las concentraciones calculadas con mínimos de 1% y máximos de hasta 17%. A continuación, se muestra en la Figura 19, el área analizada de la serie de fotografías para generar la curva de calibración y en la Tabla 2, un resumen cronológico de los datos obtenidos inicialmente con este método analítico. El porcentaje de error entre equipos, al igual que en la Tabla 1.



Figura 19: Ejemplo que muestra el área analizada de las fotografías para generar la curva de calibración.

Tabla 2: Resumen de los datos iniciales obtenidos con el método de 1,10-fenantrolina. Se presentan porcentajes de error calculados con base en la concentración calculada por ambos equipos.

Fecha	R <sup>2</sup>		%Error
	UV-1700	Colorímetro	
15/11/2017	0.9939	0.9988	1 %
18/11/2017	0.9952	0.9982	17 %
21/11/2017	0.9992	0.9950	2 %
22/11/2017	0.9998	0.9958	1 %
23/11/2017	0.9988	0.9943	11 %
27/11/2017	0.9997	0.9984	12 %
28/11/2017	0.9996	0.9954	4 %
29/11/2017	0.9994	0.9902	1 %
29/11/2017	0.9990	0.9972	4 %
29/11/2017	0.9996	0.9970	9 %
30/11/2017	0.9990	0.9968	6 %



Luego de haber realizado diferentes tipos de pruebas y cambios tanto en la aplicación como en la parte óptica del sistema colorimétrico, mejorando sustancialmente la sensibilidad y estabilidad del sistema, se procedió a verificar los parámetros de validación.

## 5.2.2 Parámetros de validación

A continuación, se presentan los resultados obtenidos en la validación del método de determinación de hierro con 1,10-fenantrolina, para el sistema colorimétrico y para el espectrofotómetro UV-1700.

### 5.2.2.1 Resultados experimentales obtenidos con el espectrofotómetro UV-1700

En la Tabla 3 se presentan los resultados obtenidos al realizar seis curvas de calibración para el método de 1,10-fenantrolina con el espectrofotómetro UV-1700.

*Tabla 3: Lecturas de absorbancia por sextuplicado de los puntos de la curva de calibración obtenidos con el espectrofotómetro UV-1700.*

UV-1700					
Estándar	0.8 mg/L	1.6 mg/L	2.4 mg/L	3.2 mg/L	4.0 mg/L
1	0.149	0.307	0.465	0.615	0.765
2	0.152	0.308	0.463	0.618	0.760
3	0.151	0.309	0.462	0.617	0.759
4	0.152	0.309	0.463	0.617	0.760
5	0.153	0.308	0.463	0.618	0.760
6	0.153	0.308	0.463	0.617	0.762
<b>PROM:</b>	0.152	0.308	0.463	0.617	0.761

En la Tabla 4 se presenta la curva de calibración utilizando los promedios de las lecturas en la Tabla 3.

*Tabla 4: Datos de las curvas de calibración obtenidos con el espectrofotómetro UV-1700.*

Curva de calibración - UV-1700	
Concentración	Absorbancia
0.0	0.000
0.8	0.152
1.6	0.308
2.4	0.463
3.2	0.617
4.0	0.761

En la Figura 20 podemos observar la representación gráfica de la curva de calibración de la Tabla 3, así como los parámetros de la regresión lineal, la ecuación de la línea recta y el coeficiente de determinación.

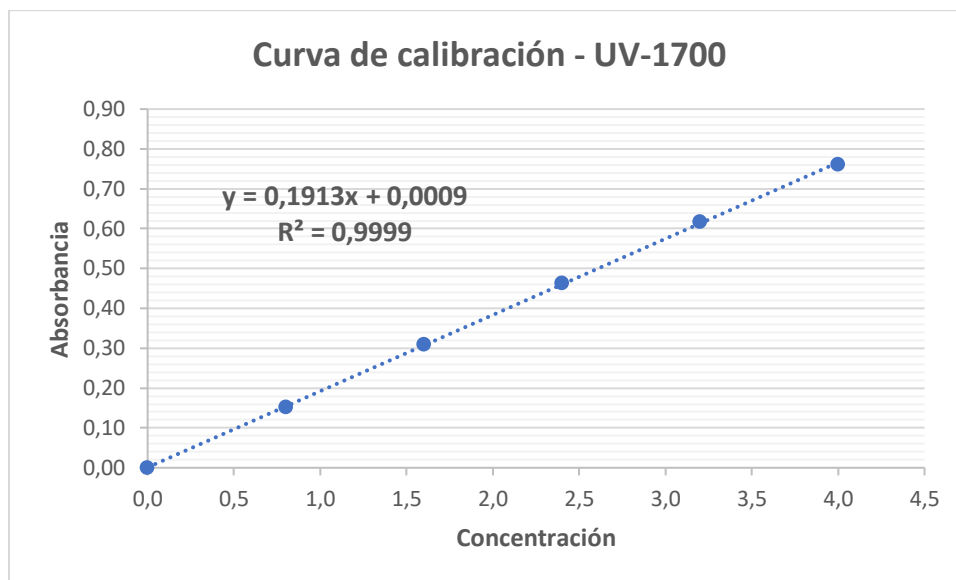


Figura 20: Curva de calibración para el método de 1,10-fenantrolina utilizando el espectrofotómetro UV-1700

Las tablas 5 y 6 presentan las lecturas de diez muestras de una disolución de referencia con concentración de 2 mg/L y 10 muestras de blanco con el espectrofotómetro UV-1700.

Tabla 5: Resultados obtenidos al analizar la disolución de referencia 10 veces con el espectrofotómetro UV-1700.

Referencia 2.0 mg/L	
Repetición	Absorbancia
1	0.388
2	0.386
3	0.386
4	0.389
5	0.388
6	0.388
7	0.388
8	0.387
9	0.388
10	0.387
Promedio	0.388
Desv. Est.:	0.001

Tabla 6: Resultados obtenidos al analizar el blanco 10 veces con el espectrofotómetro UV-1700.

Blanco	
Repetición	Absorbancia
1	0.001
2	0.000
3	0.002
4	0.001
5	0.001
6	0.000
7	0.000
8	0.002
9	0.000
10	0.001
Promedio	0.001
Desv. Est.:	0.001

### 5.2.2.2 Resultados experimentales obtenidos con el sistema colorimétrico

En la Tabla 7 se presentan los resultados obtenidos al realizar seis curvas de calibración para el método de 1,10-fenantrolina con el sistema colorimétrico.

*Tabla 7: Lecturas de absorbancia por sextuplicado de los puntos de la curva de calibración obtenidos con el sistema colorimétrico.*

<b>Colorímetro</b>					
<b>Estándar</b>	<b>0.8 mg/L</b>	<b>1.6 mg/L</b>	<b>2.4 mg/L</b>	<b>3.2 mg/L</b>	<b>4.0 mg/L</b>
1	0.03425	0.06236	0.08057	0.10552	0.13971
2	0.03493	0.06253	0.07910	0.10597	0.14113
3	0.03381	0.06420	0.08054	0.10736	0.13922
4	0.03465	0.06299	0.07983	0.10557	0.14330
5	0.03577	0.06025	0.08081	0.10655	0.14017
6	0.03413	0.06378	0.07806	0.10596	0.13930
<b>PROM:</b>	0.03459	0.06269	0.07982	0.10616	0.14047

En la Tabla 8 se presenta la curva de calibración utilizando los promedios de las lecturas en la Tabla 7.

*Tabla 8: Datos de las curvas de calibración obtenidos con el sistema colorimétrico.*

<b>Curva de calibración - Colorímetro</b>	
<b>Concentración</b>	<b>Absorbancia</b>
0.0	0.00000
0.8	0.03459
1.6	0.06269
2.4	0.07982
3.2	0.10616
4.0	0.14047

En la Figura 21 podemos observar la representación gráfica de la curva de calibración de la Tabla 8, así como los parámetros de la regresión lineal, la ecuación de la línea recta y el coeficiente de determinación.

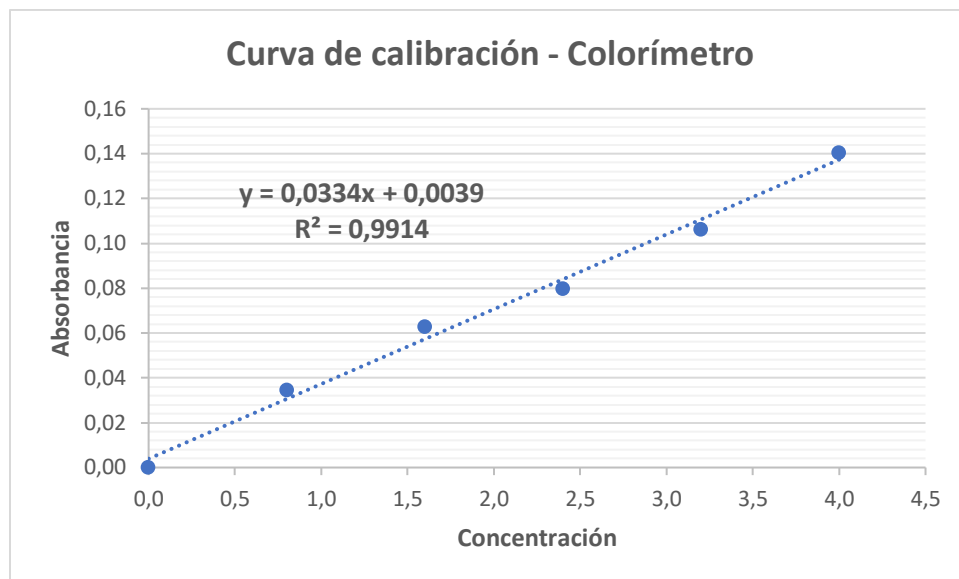


Figura 21: Curva de calibración para el método de 1,10-fenantrolina utilizando el sistema colorimétrico.

Las tablas 9 y 10 presentan las lecturas de diez muestras de una disolución de referencia con concentración de 2 mg/L y 10 muestras de blanco con el sistema colorimétrico.

Tabla 9: Resultados obtenidos al analizar la disolución de referencia 10 veces con el sistema colorimétrico.

Referencia 2.0 mg/L	
Repetición	Absorbancia
1	0.07310
2	0.07431
3	0.07246
4	0.07104
5	0.07389
6	0.07287
7	0.07402
8	0.07250
9	0.07458
10	0.07170
Promedio	0.07305
Desv. Est.:	0.00116

Tabla 10: Resultados obtenidos al analizar el blanco 10 veces con el sistema colorimétrico.

Blanco	
Repetición	Absorbancia
1	-0.00005
2	0.00057
3	0.00109
4	0.00015
5	0.00006
6	0.00046
7	0.00048
8	0.00038
9	0.00057
10	0.00053
Promedio	0.00042
Desv. Est.:	0.00032

### 5.2.2.3 Resumen de resultados experimentales

Tabla 11: Resumen de los resultados experimentales obtenidos con ambos equipos.

	UV-1700	Colorímetro
Pendiente:	0.1913	0.0334
Intercepto:	+0.0009	+0.0039
$r^2$ :	0.9999	0.9914
Lectura prom. ref:	0.388	0.07305
$\sigma$ ref:	0.001	0.00116
Lectura prom. blanco:	0.001	0.00042
$\sigma$ blanco:	0.0008	0.00032

### 5.2.2.4 Sensibilidad

Para evaluar la sensibilidad del método con el colorímetro tenemos que utilizar el valor de la pendiente de la curva de calibración. Con la primera versión del equipo, antes de retirar el lente del equipo, se obtuvo un valor de 0.0202, con la versión final se obtuvo el valor de 0.0334. La sensibilidad en este caso aumentó 1.65 veces, aunque aun así este dato está muy lejos del obtenido con el espectrofotómetro UV-1700, cuyas curvas de calibración tuvieron una pendiente de 0.1913, 5.72 veces mayor.

### 5.2.2.5 Linealidad

Los coeficientes de determinación,  $r^2$ , son: 0.9999 para el UV-1700 y de 0.9914 para el sistema colorimétrico. Estos corresponden a valores de coeficiente de correlación lineal,  $r$ , de 0.9999 y 0.9957 respectivamente. Para determinar si existe correlación lineal significativa se aplica una prueba t (J Miller, 2005). En esta prueba la hipótesis nula dice que no hay correlación, si el valor  $t$  calculado según la ecuación 15 es mayor que el  $t$  crítico de tabla, se rechaza la hipótesis nula.

$$t = \frac{|r|\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-r^2}} \quad (15)$$

Para el colorímetro, con  $r$  igual a 0.9957, 8 grados de libertad ( $n=10$ ) y 95% de confianza el valor de  $t$  calculado es de 30.4, valor que supera por mucho el valor de tabla que es igual a 2.31. Se rechaza entonces la hipótesis nula y se concluye que existe correlación lineal significativa. Según la Organización Salvadoreña de Acreditación, el criterio de aceptación  $r > 0.98$  (OSA, 2017).

### 5.2.2.6 Límites de detección

Al sustituir los datos de la tabla 11 en la ecuación 11 obtenemos lo siguiente:

$$LDD_{UV-1700} = \frac{3.3\sigma}{S} = \frac{3.3 \times 0.0008}{0.1913} = 0.014 \quad (16)$$

$$LDD_{Colorímetro} = \frac{3.3\sigma}{S} = \frac{3.3 \times 0.00032}{0.0334} = 0.032 \quad (17)$$

Las ecuaciones de la línea recta para las curvas de calibración de ambos equipos se pueden formar con los datos de la tabla 11 o se pueden tomar directamente de las Figuras 20 y 21 y son las siguientes:

$$y_{UV-1700} = 0.1913x + 0.0009 \quad (18)$$

$$y_{Colorímetro} = 0.0334x + 0.0032 \quad (19)$$

Donde el valor de  $y$  corresponde a la absorbancia y el valor de  $x$  corresponde a la concentración de la disolución.

Al evaluar los resultados de las ecuaciones 16 y 17 en las ecuaciones 18 y 19, respectivamente se tiene que:

$$LDD_{UV-1700} = \frac{0.014 - 0.0009}{0.1913} = 0.069 \text{ mg/L} \quad (20)$$

$$LDD_{Colorímetro} = \frac{0.032 - 0.0032}{0.0334} = 0.84 \text{ mg/L} \quad (21)$$

### 5.2.2.7 Límites de cuantificación

Al sustituir los datos de la tabla 11 en la ecuación 12 obtenemos lo siguiente:

$$LDQ_{UV-1700} = \frac{10\sigma}{S} = \frac{10 \times 0.0008}{0.1913} = 0.042 \quad (22)$$

$$LDQ_{Colorímetro} = \frac{10\sigma}{S} = \frac{10 \times 0.00032}{0.0334} = 0.096 \quad (23)$$

Al evaluar los resultados de las ecuaciones 20 y 21 en las ecuaciones 18 y 19, respectivamente, se tiene que:

$$LDQ_{UV-1700} = \frac{0.042 - 0.0009}{0.1913} = 0.22 \text{ mg/L} \quad (24)$$

$$LDQ_{Colorímetro} = \frac{0.096 - 0.0039}{0.0334} = 2.76 \text{ mg/L} \quad (25)$$

Los límites de detección y cuantificación calculados para el sistema colorimétrico son influenciados en gran medida por la baja sensibilidad del método (valor bajo de la pendiente de la línea recta). No obstante, los valores obtenidos son muy satisfactorios considerando, principalmente, que fueron obtenidos con un dispositivo fabricado de forma casera.

Según los límites de detección y cuantificación calculados, como era de esperarse, queda claro que el espectrofotómetro UV-1700 puede detectar y cuantificar cantidades de analito mucho menores a las del sistema colorimétrico, hasta 13 veces menores. Esto es debido a que la sensibilidad del UV-1700 es mucho mayor.

#### 5.2.2.8 Exactitud

Se obtiene la concentración calculada por ambos equipos sustituyendo el promedio de las lecturas de la disolución de referencia en las ecuaciones 18 y 19.

$$\bar{x}_{UV-1700} = \frac{0.388 - 0.0009}{0.1913} = 2.024 \text{ mg/L} \quad (26)$$

$$\bar{x}_{Colorímetro} = \frac{0.07305 - 0.0039}{0.0334} = 2.070 \text{ mg/L} \quad (27)$$

Al evaluar los resultados de las ecuaciones 26 y 27 en la ecuación 13, se tiene que:

$$\%R_{UV-1700} = \frac{\bar{x}}{x_{ref}} \times 100 = \frac{2.024}{2.00} \times 100 = 101.2\% \quad (28)$$

$$\%R_{Colorímetro} = \frac{\bar{x}}{x_{ref}} \times 100 = \frac{2.070}{2.00} \times 100 = 103.5\% \quad (29)$$

Los valores permitidos para el porcentaje de recobro para los productos no regulados están en el rango de 90 a 110%, para productos regulados, como principios activos en la industria farmacéutica, los límites son en el rango de 98 a 102% (ICH, 1997). Con el valor de 103.5%

obtenido por el colorímetro se cumple especificación para productos no regulados y se está muy cerca de cumplir para productos regulados. Según la Organización Salvadoreña de Acreditación, en el rango de concentración que se realizó el análisis, el criterio de aceptación es de 90% a 108% (OSA, 2017).

### 5.2.2.9 Precisión

Se calcula la desviación estándar relativa porcentual sustituyendo los datos de la tabla 9 en la ecuación 14.

$$DER_{UV-1700} = \frac{\sigma}{\bar{x}} \times 100 = \frac{0.001}{0.388} \times 100 = 0.26\% \quad (30)$$

$$DER_{Colorímetro} = \frac{\sigma}{\bar{x}} \times 100 = \frac{0.00116}{0.07305} \times 100 = 1.59\% \quad (31)$$

El valor máximo aceptado para la Desviación Estándar relativa es del 2% (ICH, 1997). Esto permite concluir que, a pesar de ser un valor mayor al obtenido con el espectrofotómetro UV-1700, sigue estando en el rango permitido.

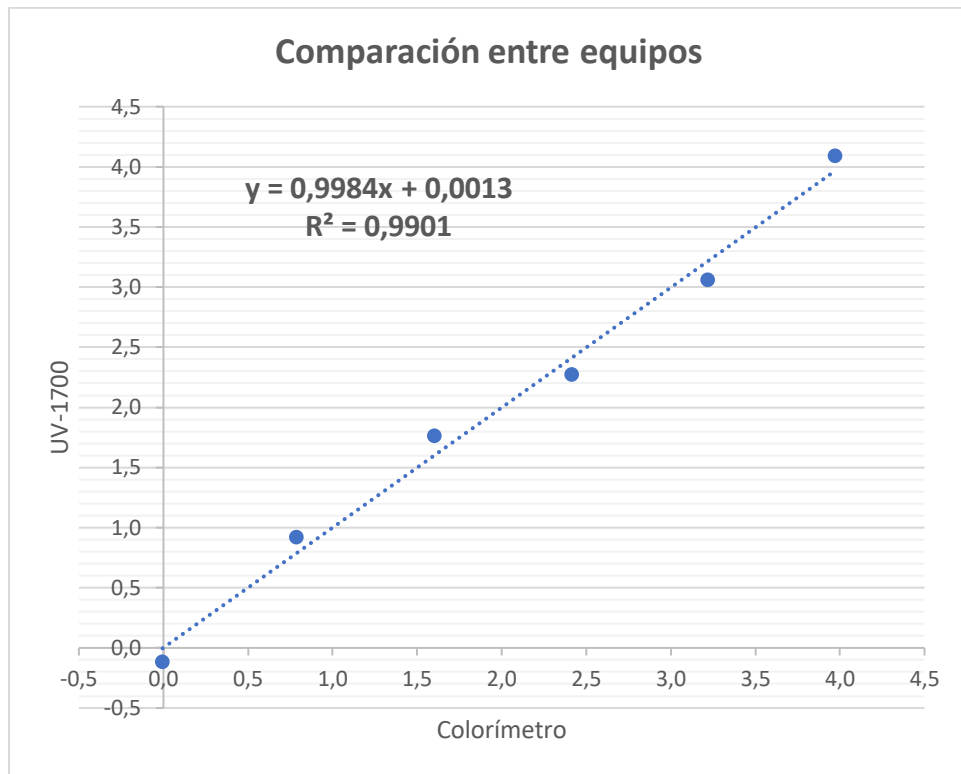
### 5.2.3 Comparación entre equipos

Para comparar los resultados de ambos equipos, se utiliza lo descrito según Miller (J Miller, 2005) para comparación de dos métodos mediante los datos de su curva de calibración. Para ello se presenta, en la Figura 22, la gráfica de los valores de concentración obtenidos al evaluar las absorbancias de la curva de calibración en la ecuación de la línea recta de ambos equipos.

En la gráfica de regresión lineal presentada en la Figura 22 podemos observar que el coeficiente de determinación,  $r^2$ , es igual a 0.9901; lo que corresponde a un valor de  $r$  de 0.9950. Idealmente, el valor de  $r$  debe ser igual a 1, la diferencia entre ambos valores es de 0.5%. Aplicando la prueba  $t$  de dos colas según Miller (J Miller, 2005) con  $r$  igual a 0.9950, 4 grados de libertad ( $n=5$ ) y 95% de confianza el valor de  $t$  calculado, según la ecuación 15, es de 20, valor que supera por mucho el valor de tabla que es igual a 2.78. Se rechaza entonces la hipótesis nula y se concluye que existe correlación lineal significativa.

Estos resultados indican que la correlación entre los resultados obtenidos por ambos equipos es bastante buena según este método de comparación.





*Figura 22: Gráfica de comparación de equipos. En el eje x los resultados del sistema colorimétrico y en el eje y los del UV-1700.*

## 6 CONCLUSIONES

Una vez finalizado el trabajo de investigación se concluye lo siguiente:

- ✓ Se logró satisfactoriamente, diseñar, montar y poner en funcionamiento un sistema colorimétrico portable y de bajo costo. Esto incluye, tanto las partes de soporte, electrónica y óptica, como la aplicación Android para registro y tratamiento de datos.
- ✓ Se logró calcular los parámetros de validación propuestos para el método de 1,10-fenantrolina, tanto para el espectrofotómetro UV-VIS, como para el colorímetro. Donde la linealidad y la precisión cumplen con los requerimientos establecidos, la exactitud cumple los requerimientos para productos no regulados y los límites de detección y cuantificación deben ser disminuidos optimizando la sensibilidad del sistema colorimétrico.
- ✓ La comparación entre equipos utilizando los datos de las curvas de calibración permite concluir que existe muy buena correlación, arriba del 99%, en los resultados obtenidos por el espectrofotómetro UV-1700 y el sistema colorimétrico.

## 7 RECOMENDACIONES

- ✓ Realizar estudios sobre la influencia de la calidad de la cámara fotográfica en los resultados obtenidos con el sistema colorimétrico.
- ✓ Realizar estudios exhaustivos sobre la influencia de la intensidad del LED en los resultados obtenidos con el sistema colorimétrico.
- ✓ Realizar determinaciones colorimétricas de diferentes metales o especies con grupos cromóforos utilizando el sistema colorimétrico.
- ✓ Realizar estudios variando la expresión matemática para el cálculo de la absorbancia utilizando modelos de color diferentes, como el HSV o HSL.
- ✓ Utilizar el sistema colorimétrico como herramienta en la enseñanza de la química, incluyéndolo en las prácticas de laboratorio de asignaturas como Análisis Instrumental y otros proyectos de investigación.

## 8 BIBLIOGRAFÍA

- A. Underwood, R. D. (1989). *Química Analítica Cuantitativa 5ta Ed.* México, D.F.: Pearson / Prentice Hall.
- B. Magnusson, U. Ö. (2014). *Eurachem Guide: The Fitness for Purpose of Analytical Methods – A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics, 2da Ed.* ISBN 978-91-87461-59-0: Disponible en [www.eurachem.org](http://www.eurachem.org).
- D. R. Malinin, J. H. (1961). Development of the Laws of Colorimetry. *J. Chem. Educ.*, 129-131.
- D. Skoog, F. H. (2008). *Principios de análisis instrumental - 6ta Ed.* México, D.F.: Cengage Learning.
- ICH. (1997). Q2B: Validation of Analytical Procedures: Methodology. *International Conference on Harmonisation of Technical Requirements for Registration of Pharmaceuticals for Human Use* .
- J Miller, J. M. (2005). *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry.* 5th Ed, Great Britain: Ashford Color Press.
- Jensen, W. (2014). *Colorimeters.* Cincinnati: Oesper Collections, University of Cincinnati.
- K. N. Plataniotis, A. N. (2000). *Color Image Processing and Applications.* Springer.
- N. Lopez, V. C. (2014). Smartphone-based simultaneous pH and nitrite colorimetric determination for paper microfluidic devices. *Anal. Chem*, Just Accepted Manuscript. DOI: 10.1021/ac5019205.
- N. Ohta, A. R. (2005). *Colorimetry Fundamentals and Applications.* John Wiley & Sons.
- OSA, O. S. (2017). *Sistema De Gestión De Calidad, G 9.6 Validación de Métodos Analíticos Fisicoquímicos, Versión 2.*

- R. Bud, D. J. (1998). *Instruments of Science: An Historical Encyclopedia*. New York, NY: Garland. pp. 123-124.
- R. Hunt. (2004). *The Reproduction of Colour 6th ed.* Chichester UK: Wiley–IS&T Series in Imaging Science and Technology. ISBN 0-470-02425-9.
- Robertson, N. O. (2005). *Colorimetry Fundamentals and Applications*. John Wiley & Sons Ltd.
- Rodgers, G. (1995). *Introducción a la química de coordinación, del estado sólido y descriptiva*. España: McGraw-Hill.
- S. Dutta, G. P. (2016). Protein, enzyme and carbohydrate quantification using smartphone through colorimetric digitization technique. *J. Biophotonics* 1–11, DOI 10.1002/jbio.201500329.
- Y. Jung, J. K. (2015). Smartphone-based colorimetric analysis for detection of saliva alcohol concentration. *Applied Optics* Vol. 54, No. 31, <http://dx.doi.org/10.1364/AO.54.009183>.
- Y. Reyes, I. V. (2016). Contaminación por metales pesados: implicaciones en salud, ambiente y seguridad alimentaria. *Revista Ingeniería, Investigación y Desarrollo*, Vol. 16 N° 2.