



ASUNTO: INFORME FINAL PRODEP

Dr. Efraín C. Morales Castro
Secretario Académico y Representante Institucional ante PRODEP
PRESENTE:

La que suscribe, Dra. Alejandra Tovar Corona, hace de su conocimiento las actividades realizadas durante el periodo **01 noviembre 2015 al 28 de febrero 2018**, las cuales corresponden a la ejecución del proyecto titulado ***“Desarrollo de absorbentes de metales pesados tóxicos Cr y Hg y su aplicación en tratamiento de aguas contaminadas”***

Resumen:

Este trabajo propone una potencial alternativa de solución a la contaminación de los cuerpos de agua por metales pesados a través del desarrollo de materiales con la capacidad de absorción, adsorción y reducción de los mismos, acorde a las nuevas políticas internacionales sobre el ambiente para lograr un desarrollo sostenible.

Una de las estrategias innovadoras del proyecto es la elaboración de sistemas absorbentes para generar procesos de captación a través ligantes biosintéticos, mezclados con extractos y fibras naturales para el desarrollo de biofiltros, a partir de materiales de fácil adquisición y bajo costo. Una de las ventajas de estos materiales, es la utilización de subproductos de origen agrícola e industrial para generación de dispositivos con alto valor agregado, por su abundancia y conveniencia económica. Por otro lado, para la remoción de metales pesados, es bien sabido, que una de las formas más eficientes de adsorción, es a través de ligantes orgánicos que permitan “anclar” al metal por medio de especies donadoras de electrones, formando en consecuencia complejos metálicos, estables y de fácil remoción.

La presente propuesta utiliza como un aditivo ligante biosintéticos obtenidos a partir de extractos naturales por métodos de la química verde. Dichos ligantes, al entrar en contacto con los iones metálicos presente en el agua los "atrapa" (debido a su alta actividad quelante) formando un precipitado instantáneo que disminuye hasta en un 80% la concentración de ion tóxico en los afluentes acuíferos, de acuerdo con estudios previos que hemos realizado, en una segunda etapa estos iones son reducidos a formas menos tóxicas, evitando así generar subproductos dañinos y que impliquen sólo el traslado dirigido de contaminantes. Este proceso puede entonces permitir el saneamiento de aguas, de manera eficiente, económica y aplicable a un gran número de efluentes industriales, incluyendo a las del área metal mecánicas, industria floreciente en nuestra región.



Objetivo general:

Desarrollar y evaluar sistemas absorbentes de metales pesados a partir de ligantes *N*-donadores, biosintetizados a partir de química verde y compuestos obtenidos de extractos naturales.

Objetivo específico:

- Sintetizar ligantes *N*-donadores, a partir de compuestos de origen natural por métodos de la química verde.
- Evaluar la actividad quelante de dichos ligantes frente a iones metálicos en aguas modelo de concentración conocida y dar seguimiento mediante espectrofotometría UV-VIS y absorción atómica.
- Generar un prototipo para el tratamiento de aguas residuales contaminadas por metales pesados.

Porcentaje alcanzado:

100%

Descripción del avance del proyecto:

Este proyecto se desarrolló en 4 etapas:

Etapa 1. Obtención y purificación de aldehídos a partir de extractos orgánicos vegetales para la síntesis de ligantes *N*-donadores.

Etapa 2. Síntesis verde y caracterización espectroscópica de una serie de nuevos ligantes *N*-donadores a partir de la condensación de aldehídos de origen natural y poliaminas aromáticas

Etapa 3. Evaluación de la actividad quelante de dichos ligantes frente a iones metálicos en aguas modelo de concentración conocida y dar seguimiento mediante espectrofotometría UV-VIS y absorción atómica.

Etapa 4. Generación de un prototipo para el tratamiento de aguas residuales contaminadas por metales pesados.

En este sentido los resultados obtenidos se describen a continuación.

El presente estudio nos permitió desarrollar un biofiltro a base de fibras naturales, extractos orgánicos y ligantes polidentados para la remoción de metales pesados y evaluar el papel que desempeña cada uno de los componentes en la disminución de metales pesados en aguas modelo contaminadas. Este sistema se desarrolló a partir del bagazo de *Agave potatorum* como adsorbente y un extracto etanólico de *Citrus sinensis* como bioreductor, a través de procesos biotecnológicos reduciendo el cromo tóxico de una forma eco-amigable. Además, fue mejorado con ligantes quelantes polidentados los cuales aumentaron la eficacia del biofiltro.



Desarrollo Experimental

Los espectros de IR fueron registrados en un aparato Nicolet FT-IR Magna 700 en pastillas de KBr y de polietileno. Los espectros de masas mediante la técnica de impacto electrónico IE fueron registrados con un espectrómetro JEOL JMS-SX 102A operado en el modo ion positivo a 70 eV, los espectros de masas FAB⁺ se registraron con un espectrómetro JEOL JMS AX505HA; los datos están expresados en unidades masa /carga (m/z). Los puntos de fusión fueron medidos utilizando un aparato Melt-Temp II y no están corregidos. Las reacciones fueron monitoreadas por cromatografía en placa fina, empleando cromatoplasmas analíticas de óxido de aluminio TLC60F₂₅₄ neutras de 0.54 mm de espesor. La extracción de la fase orgánica a partir del crudo de reacción se realizó mediante extracciones con acetato de etilo y agua tridestilada. La separación de las mezclas de reacción se efectuó mediante placa preparativa DC-Fertigplatten SIL G-100 UV₂₅₄, 1,0mm. La placa preparativa se fue eluyendo con una proporción 7:3 de Hexano/Acetato de etilo, los cuales fueron previamente destilados.

2.1. Síntesis de base de Schiff L1 y preparación de solución ligante.

Se sintetizó el ligante polidentado *N*-donador mediante condensación agregando cinamaldehído con la amina primaria en una proporción estequiométrica 3:1 equivalentes en un matraz de bola, dejando en agitación durante 24 horas, posteriormente se hicieron lavados con agua destilada y extracciones con acetato de etilo [29-31]. La solución amarilla resultante fue secada sobre Na₂SO₄ anhidro. Por último, se dejó cristalizando en una mezcla AcOEt/Hexano 1:1, obteniendo cristales amarillos con un rendimiento de 96%. A partir del compuesto obtenido, se preparó una solución 3.10⁻³ M, utilizando 0.4g de ligante L1 Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden) amino) etil) imina y aforando a 250 ml con acetona como disolvente.

2.2. Desarrollo de biofiltro a partir de *Agave potatorum* y *Citrus sinensis*

La naranja dulce (*Citrus sinensis*) fue obtenida de manera comercial, seleccionando las frutas que presentaran color característico, que no presentaran manchas o abolladuras en la cascara.

Se pesaron 150 gr de cascara de naranja, se colocaron en el cartucho de extracción del equipo Soxhlet y se adicionaron 300 mL de etanol absoluto. Se colocó a reflujo con un tiempo de reacción de 3 horas con agitación. Una vez obtenido el extracto se concentró hasta obtener un volumen final de 50 mL utilizando vacío a presión reducida.

Las muestras de *Agave potatorum* fueron hojas basales obtenidas de plantas cultivadas de 8 años.

Obtenidas las hojas (100gr), se procedió a lavarlas cuidadosamente con agua tridestilada hasta obtener hojas libres de polvo, posteriormente se trituró hasta alcanzar una fase sólido líquido para ser posteriormente separada por filtración, la fase sólida (fibra) se deshidrató por convección natural para su posterior uso en la extracción. Posterior a esto se procedió a un secado en estufas a 80°C por 24hrs y la fibra seca se combinó con 50mL de la solución quelante-bioreductora, generando una masilla que fue empaquetada en una columna de vidrio.



Los 50mL de solución quelante-bioreductora fue obtenida utilizando distintas cantidades del extracto orgánico (0-25mL), 25mL del ligante L1 y completando la solución con agua tridestilada (0-25mL) hasta alcanzar un volumen constante de 50mL. Cada prueba se realizó por triplicado para garantizar la repetitividad de los resultados.

2.3. Técnica colorimétrica para cuantificación de cromo hexavalente [32].

250 mg de difenilcarbazida se disolvieron en 50 mL de acetona. 141,4 mg de dicromato de potasio seco se disuelve con agua y se afora a 100mL. Un mililitro de esta disolución es equivalente a 500,0 μg de Cr (VI). Se adicionó una alícuota de 1 mL de la disolución madre de cromo (VI) a un matraz volumétrico de 100 mL y se aforó con agua destilada. 1 mL de esta disolución equivale a 5,0 μg de Cr (VI).

La muestra problema fue ajustada a $\text{pH}<2$ con ácido sulfúrico 0.2 N, se tomó una alícuota de 100 ml y se agregan 2 ml de la disolución de difenilcarbazida, se mezcla y se deja reposar por 10 min para desarrollar el color completamente.

2.3.1. Curva de calibración.

Se midieron volúmenes de disolución estándar de Cr (VI) 5,0 $\mu\text{g}/\text{mL}$ entre 2,0 mL y 20,0 mL de esta disolución para obtener estándares en el intervalo de 10 ppm a 100 ppm de Cr (VI). Se agregó ácido sulfúrico 0,2 N hasta llegar $\text{pH}<2$ y se siguió el procedimiento para el desarrollo de color, posteriormente se midió su absorbancia en el espectro UV-VIS a 540nm.

2.4. Evaluación quelante y bioreductora.

Con la finalidad de evaluar la capacidad quelante y bioreductora de nuestros distintos componentes, llevamos a cabo tres experimentos (cada uno por triplicado), en el primero de ellos (Experimento A) se buscó conocer la proporción metal-ligante ideal para poder obtener la mayor cantidad de complejos, suponiendo una unión 1:1 entre cada molécula orgánica y cada uno de los iones metálicos Cr^{6+} . Sin embargo, al tratarse de un ligante polidentado, se puede pensar en que dicha proporción cambie.

Posteriormente debido a los altos volúmenes (100mL) de solución problema y hasta 70mL de solución orgánica utilizados en los primeros experimentos, se decidió realizar pruebas alineadas a las técnicas verdes (experimento B) con un modelo a escala, manejando volúmenes máximos de 5mL. Por último, se integró el ligante orgánico, al sistema bioreductor y el bagazo de *Agave potatorum* para evaluar la eficacia del sistema biotecnológico desarrollado para la adsorción-reducción del metal tóxico (experimento C).



2.4.1. Experimento A.

A las soluciones estándar de Cr(VI) se les agregó el ligante L1 en las proporciones descritas en la tabla 1. Estas soluciones se hicieron reaccionar de acuerdo con la técnica antes mencionada para el desarrollo de color y se leyeron a los 10 minutos en una celda de cuarzo a 540 nm.

Cr (VI) [100ppm]	SOLUCIÓN L1	Difenilcarbazida
100 ml	0 ml	2ml
66,6ml	33,3ml	2ml
50,0ml	50.0ml	2ml
33.3mL	66.6mL	2ml

Tabla1: Componentes de aguas modelo experimento A

2.4.2. Experimento B.

Se prepararon soluciones modelo a escala con 3 ml como volumen final, se tomaron alícuotas de la disolución estándar de Cr (VI) y de la solución de ligante con las proporciones señaladas en la tabla 2. A cada una de las muestras se les hicieron reaccionar de acuerdo con la técnica para el desarrollo de color y se leyeron a 540 nm de acuerdo con la normatividad oficial para determinación de cromo hexavalente en aguas residuales.

Cr (VI) [100ppm]	LIGANTE L1	DIFENILCABAZIDA
3,0 mL	0 mL.	60µL
2.0 mL.	1.0 mL	
1.5. mL.	1.5.0 mL	
1.0 mL	2.0 mL	

Tabla2: Componentes de aguas modelo experimento B

2.4.3. Experimento C

La mezcla preparada según la descripción del apartado 2.2 y según las proporciones señaladas en la tabla 3, se dejó secar a temperatura ambiente y fue colocada en columnas cromatográficas de vidrio.

Sobre la misma se hicieron pasar 50mL de una solución estándar de Cromo (VI) con una concentración de 100ppm, la cual fue recuperada y tratada de acuerdo con la norma correspondiente para conocer su concentración por espectrofotometría UV-Vis.

No.	Solución Ligante L1	Extracto orgánico (mL.)	H2O (mL.)
1	25 mL.	0	25
2		5	20
3		10	15



4		15	10
5		20	5
6		25	0

Tabla 3: Proporciones de mezcla quelante-bioreductora

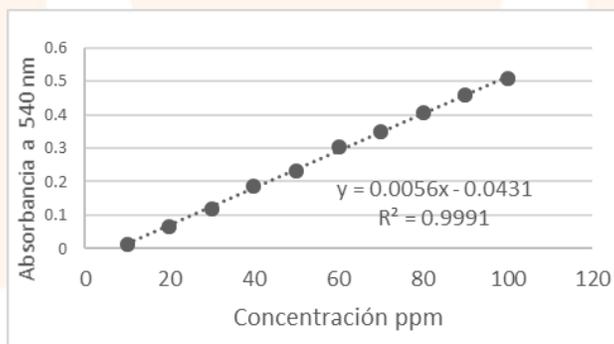
3. Resultados y discusión.

3.1. Obtención del ligante L1.

El ligante L1 se obtuvo con un rendimiento del 96% como un sólido cristalino amarillo con p.f=85°C en su espectroscopia FT-IR se encuentran bandas de absorción con frecuencias de 1666.49 cm^{-1} (ν) C=N; 1624.752 cm^{-1} (ν) (C=C), 1115.654 cm^{-1} (ν) (C-N); 680.10 cm^{-1} (ν) (C-H) fuera de plano. En el espectro de masas por impacto electrónico se observa el ion molecular del compuesto $m/z = M^+ + H_2O = 501$ y confirmando la fórmula molecular propuesta $C_{33}H_{36}N_4$. Estos parámetros permiten determinar cuantitativamente los componentes del ligante sintetizado N-donador.

3.2. Curva de calibración

Se realizaron diluciones con diferentes concentraciones de cromo hexavalente que fueron desde aquella que tenía 10ppm hasta la que su concentración era de 100ppm de dicho metal, posteriormente se sometió a la técnica de desarrollo de color para realizar las lecturas de absorbancia en el espectrofotómetro UV-VIS, después de hacer las lecturas de absorbancia a 540nm observadas en la tabla 4, este gráfico nos ayudó como referencia para determinar la cantidad de Cr (VI) presente las siguientes muestras estudiadas [32].



Gráfica 1 Curva de calibración A540nm

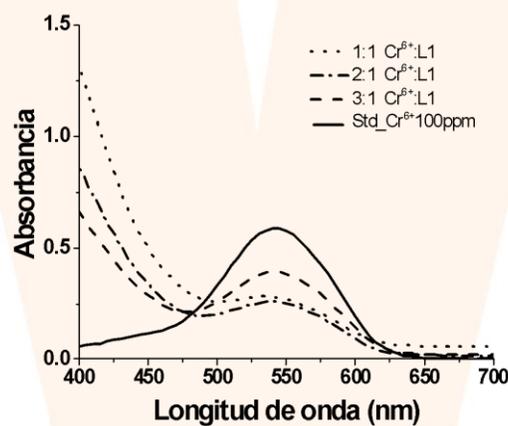
3.3. Experimento A.

En la figura 1 verificamos que el ligante sintetizado tiene la capacidad de reducir en diferentes proporciones la cantidad de Cr(VI) gracias al efecto quelante que presenta, formando un complejo metal-ligante, el cual macroscópicamente se puede observar en forma de precipitado. Las muestras que contenían una mayor cantidad de ligante respecto al Cr, no mostraron lectura a 540nm, puesto que prevalecía la cantidad de ligante y el cromo hexavalente es atrapado en su



totalidad; mientras que aquellas en las que había una cantidad menor de ligante contra la cantidad de Cr (VI) (muestras 2:1 y 3:1), mostraron una reducción considerable, siendo menor la que contiene 2:1 equivalentes de Cr (VI):L1. La efectividad de la actividad quelante se evaluó con base en la curva de calibración correspondiente de acuerdo con la norma NMX-044, observando una disminución del ion hexavalente hasta en un 87%, esto nos permite verificar no sólo la eliminación del ion libre en aguas modelo sino la proporcionalidad quelante superior a la proporción 1:1 comprobando que nuestro ligante tiene un mayor efecto quelante que el esperado.

Figura 1: Espectro UV-VIS experimento A.



3.4. Experimento B.

Se trabajaron disoluciones a escala con un volumen final de 5mL apegándonos al fundamento del experimento A. Repitiendo la metodología y a partir de una dilución estándar de 100ppm se mezclan distintas proporciones de acuerdo con lo descrito en la tabla 2. En la figura 2 se puede observar que todas las mezclas Cr-Ligante tienen una absorbancia menor al estándar, siendo la menor la que tiene una proporción 4:1, lo que señala que la capacidad quelante depende de los volúmenes del ion Cr⁶⁺ manejados en la solución y no sólo de la concentración. Por lo tanto se reitera que la capacidad quelante de metales pesados del ligante Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina L1, es realmente efectiva ya que se reduce hasta en un 87%, gracias a la formación de quelatos que precipitan y a los cuales posteriormente se les puede hacer un diferente tratamiento de purificación para el control de contaminación por dicho metal.

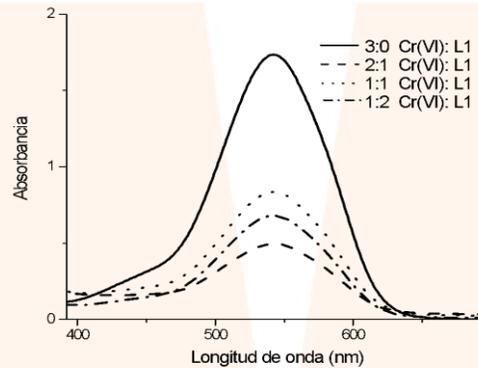


Figura 2. Espectro UV-vis experimento B

3.4. Experimento C

La solución pasada por el biofiltro muestra una disminución en la absorbancia característica a los 540nm lo que corrobora la eliminación cuantitativa del ion Cr^{6+} , el sistema estudiado mostró propiedades de adsorción comparables a las de la alúmina comercial (97%) de eliminación de Cr(VI) [33,34]. En todas las repeticiones, la columna que mostró la menor absorbancia es la que contiene la mezcla 4: 25ml de ligante L1/ 15 mL de extracto bioreductor/ 10mL de H_2O soportados sobre el adsorbente de *Agave potatorum* (Figura 3), obteniendo una efectividad de reducción-adsorción hasta del 96%, lo que nos permite estandarizar las proporciones en nuestro biofiltro.

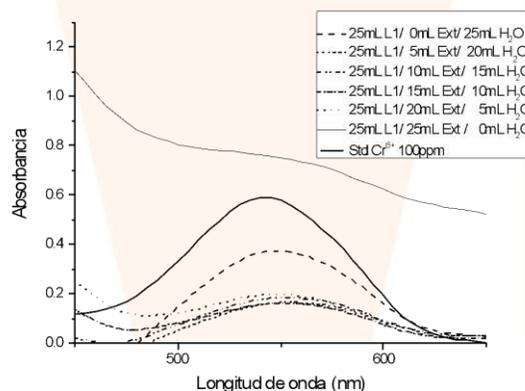


Figura 3. Espectro UV-vis experimento C

Conclusión

A partir de los análisis realizados obtuvimos que, debido a la gran cantidad de metabolitos presentes en el *Agave potatorum* existe una disminución de las concentraciones de los metales contaminantes, ya que estos coadyuvan en la reducción del metal y en sí en el proceso descontaminante en aguas modelo. La actividad antioxidante encontrada en los extractos de



Agave potatorum debe atribuirse a la presencia de flavonoides y otros compuestos fenólicos que contiene.

Se demostró que utilizar la fibra de *Agave potatorum* y el extracto orgánico de la naranja dulce (*Citrus sinensis*), son una potencial solución a la gran problemática de contaminación que existe en las aguas residuales con metales pesados, debido a que ambos componentes son ricos en propiedades benéficas tales como los metabolitos y antioxidantes, los cuales son altamente eficaces para la adsorción de metales pesados.

Al evaluar la actividad reductora de nuestro biofiltro frente al cromo hexavalente en aguas modelo se obtuvo una reducción experimental de 46.2% y al momento de ser modelado este proceso por regresión lineal nos dio un resultado real de 45% en la reducción de cromo hexavalente.

Este sistema convierte al ion tóxico Cr(VI) en iones biocompatibles gracias a que cuenta con un adsorbente orgánico bagazo de (*Agave potatorum*) y el extracto etanólico de la naranja dulce (*Citrus sinensis*) y quelantes polidentados de tipo Bases de Schiff.



Metas:

1. Formación de talento humano a nivel de Licenciatura.

La alumna VASHTI LUZ PEREZ ALVAREZ egresada de la Ingeniería en Biotecnología reportó los resultados del proyecto en su trabajo de tesis titulada: “Elaboración y evaluación de un biofiltro reductor de Cromo (VI) en aguas modelo” el cual ha sido registrado ante las instancias académicas correspondientes. Actualmente dicho trabajo ha sido concluido y se encuentra en la etapa final de evaluación por parte del comité revisor y el acto protocolario de defensa de tesis se tiene programado para el día 14 de marzo de 2018.

Por otra parte, se realizó la asesoría de distintos alumnos en estancias y estadías para el desarrollo del proyecto generándose los siguientes productos:

Nombre del alumno(a)	Nombre del Proyecto	Tipo de producto
Abigail Selene Pantaleón Pérez	Separación de mezclas de metabolitos secundarios de Agave potatorum y su seguimiento espectrofotométrico	Asesoría Académica
Ana Paola García Mexicano	Obtención de extractos orgánicos a partir de plantas de la región	Asesoría Industrial
Ana Paola García Mexicano	Extracción, identificación y clasificación de metabolitos de plantas de la región	Reporte técnico
María Guadalupe Sosa Martínez	Extracción, identificación y caracterización de metabolitos de plantas de la región	Reporte técnico
Vashti Luz Pérez Álvarez	Elaboración y evaluación de un biofiltro reductor de cromo hexavalente en aguas modelo	Reporte técnico
Josué Sánchez Flores	Validación y modelación de un biofiltro reductor de cromo hexavalente mediante técnicas matemáticas y estadísticas	Reporte técnico

Toda la información generada de estos reportes, así como las evidencias de asesorías se anexan al presente (ANEXO 1)

2. Un prototipo que pueda ser aplicado de manera sencilla en el tratamiento de efluentes provenientes de aguas contaminadas con metales.

Se desarrolló un prototipo reductor de metales pesados y se evaluó la eficacia del mismo frente a aguas modelo, los resultados de dichas pruebas fueron presentadas en el reporte de estadía profesional de la alumna Vashti Luz Perez Alvarez y presentado en distintos foros, nacionales e internaciones (ANEXO 2)

3. Artículo Arbitrado

El trabajo fue publicado en el volumen 3 la revista Tópicos de Investigación en Ciencias de la Tierra y Materiales, el cual fue evaluado de manera colegiada por el Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo (ANEXO 3)



Tovar-Corona A., Vázquez-Cuchillo O., Moreno-Luna F.B., Hernández-Tosca D.C. Sistema biotecnológico para reducción de cromo (VI) en aguas residuales. *Tópicos de Investigación en Ciencias de la Tierra y Materiales* (2016), 3, 163-174. ISSN: 2395-8405

4. Artículo de difusión y divulgación:

Los resultados preliminares del proyecto fueron presentados en la 11ª reunión Internacional de Investigación en Productos Naturales y publicado en el suplemento especial de la Revista Latinoamericana de Química ISSN:0370-5943 (ANEXO 4)

Esmeralda M. Sánchez-González, J. Jaime Vázquez-Bravo, Jorge E. Zamora-Castro, Rodolfo Alfredo Mena-López, Alejandra Tovar-Corona. DESARROLLO DE UN ABSORVENTE DE Cr (VI) DERIVADO DE LA CANELA (*Cinnamomum gromaticum*) Y SU APLICACIÓN EN EL TRATAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS. *Revista Latinoamericana de Química* (2015) Vol 43. ISSN: 0370-5943

5. Artículo en revista indexada

Finalmente, los resultados del desarrollo y evaluación del prototipo “Biofiltro reductor de Cr(VI) para el saneamiento de aguas contaminadas” fueron publicados en el volumen 35 de la revista *Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología* ISSN:1870-056X la cual se encuentra indizada en LATINDEX. <http://www.latindex.org/latindex/ficha?folio=24988> (ANEXO 5)

Vashti L. Perez- Alvarez, Alejandra Tovar-Corona*, J. Jaime Vázquez Bravo, M. del Rayo Guevara Villa. Biofilter reducer to Cr(VI) for the sanitation of contaminated water. *Revista de Ciencias básicas, Ingeniería y Tecnología* (2017), 35, 114-119. ISSN: 1870-056X

6. Participación en congresos nacionales e internacionales

Se presentaron los resultados preliminares en el IX International Congress on Chemical Sciences, Technology and Innovation en la Habana, Cuba en una ponencia oral y un cartel, ambos fueron publicados en las memorias correspondientes (ANEXO 6)

1. Biomaterials for effluents treatment impacted by biotic pollutants

Autor(es)	Zamora-Castro J., Leal-Rodríguez A., Hernández-Zarate G., Juárez-Figueroa J.L., Tovar-Corona A., Guevara-Villa M.R., Juárez- Lucero J.J.
Nombre del congreso donde se presentó	IX International Congress on Chemical Sciences, Technology and Innovation
País	CUBA
Estado	La Habana
Ciudad	Habana
Año	2015



2. Síntesis de ligantes polidentados y su aplicación en el tratamiento de aguas contaminadas con Cr(VI)

Autor(es)	Tovar-Corona A., Vázquez-Bravo J.J., Vázquez-Cuchillo O., Palafox-Zamora L.J., López-Pérez J.
Nombre del congreso donde se presentó	IX International Congress on Chemical Sciences, Technology and Innovation
País	CUBA
Estado	La Habana
Ciudad	Habana
Año	2015

3. Caracterización fitoquímica de Agave potatorum para la elaboración de un biofiltro

Tipo	Memorias en extenso
Autor(es)	Perez Alvarez Vashti L., Romero Blázquez M. Fernanda, Sánchez Flores Josué, Bravo Nieves Arianna, Tovar Corona Alejandra
Nombre del congreso donde se presentó	Segundo Congreso de Biotecnología Diversa
País	MÉXICO
Estado	Puebla
Ciudad	Puebla
Año	2017

También se presentaron los resultados en el IX encuentro de Investigación del Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales el 29 de septiembre del año 2016, en el instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

Autor(es)	Tovar-Corona Alejandra, Vázquez-Cuchillo Odilón, Moreno-Luna Francisco B., Hernández-Tosca Diego C.
Título	Sistema biotecnológico para reducción de cromo (VI) en aguas residuales
Descripción	Ponencia ORAL
Año	2016
Propósito	Investigación aplicada

El prototipo fue presentado en el 6º Simposio Nacional de Ingeniería Química y Bioquímica Aplicada-Foro Regional AMIQ 2017, en la Universidad Autónoma de Tlaxcala el 13 de Septiembre de 2017.

Autor(es)	Vashti L. Perez Alvarez, J. Jaime Vázquez Bravo, M. del Rayo Guevara Villa, Alejandra Tovar Corona
-----------	--



Título	Biofiltro reductor de Cr(VI) para el saneamiento de aguas contaminadas
Descripción	Presentación oral en 6° Simposio Nacional de Ingeniería Química y Bioquímica Aplicada
País	MÉXICO
Año	2017
Propósito	Generación de conocimiento

Y en el Segundo Congreso de Biotecnología Diversa se presentó en modalidad de cartel, la caracterización Fitoquímica del Agave potatorum utilizado en el desarrollo del Biofiltro. En Puebla, Puebla el 20 de octubre de 2017.

Autor(es)	Perez Alvarez Vashti, Romero Blázquez M. Fernanda, Sánchez Flores Josué, Bravo Nieves Ariana, Tovar Corona Alejandra
Título	Caracterización fitoquímica de Agave potatorum para la elaboración de un biofiltro
Descripción	Presentación de cartel en el 2° Congreso de Biotecnología Diversa
País	MÉXICO
Año	2017

Sin más por el momento, agradezco la atención prestada y quedo de usted para cualquier aclaración.

ATENTAMENTE

“Ciencia e Imaginación para Transformar”

CUATRO VECES HEROICA PUEBLA DE ZARAGOZA A 21 DE FEBRERO DE 2018

Dra. Alejandra Tovar Corona
PROFESORA DE TIEMPO COMPLETO



Tópicos de Investigación en Ciencias de la Tierra y Materiales

Septiembre 2016

ISSN:2395-8405

Vol. 3

Directorio

Humberto A. Veras Godoy
Rector

Adolfo Pontigo Loyola
Secretario General

José Luis Antón de la Concha
Coord. de la Div. de Extensión y Cultura

Orlando Ávila Pozos
Director del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

Ma. Aurora Veloz Rodríguez
**Jefa del Área Académica de Ciencias de la Tierra y
Materiales**

Juan Marcial Guerrero Rosado
Subdirector de Ediciones y Publicaciones

Contenido

TÓPICO I: CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES 1

I.1-MÉTODO RÁPIDO DE CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE CONCRETO RECICLADO MEDIANTE MEB-EDS	2
I.2-ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA Y PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE LA FASE OBTENIDA A PARTIR DEL $(C_2H_3O_2)_2Fe$ Y $(C_2H_3O_2)_2Sr$ OBTENIDA POR EL MÉTODO POLIOL.....	10
I.3-ACONDICIONAMIENTO Y CARACTERIZACIÓN DE BACTERIAS ELECTRÓTROFAS PARA LA FORMACIÓN DE BIOPELÍCULAS.....	15
I.4-CARACTERIZACIÓN DE PARTÍCULAS METÁLICAS DE E-WASTE	24
I.5-EFECTO DEL TRATAMIENTO TERMOQUÍMICO DE BORURIZACIÓN EN LA ADHERENCIA Y RUGOSIDAD SUPERFICIAL DEL ACERO DIN UC1.....	32
I.6-SÍNTESIS DE CUMARINAS FLUORESCENTES	45
I.7-SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS DE TIPO IMINA OBTENIDOS POR LA RUTA DE MECANOSÍNTESIS PARA APLICACIONES EN OPTOELECTRÓNICA	53
I.8-CARACTERIZACIÓN DE UN MINERAL PROVENIENTE DE LA MINA CONCORDIA, ZIMAPÁN, HIDALGO	59

TÓPICO II: METALURGIA EXTRACTIVA 67

II.1-OXIDACIÓN SUPERFICIAL DEL ZnS DURANTE LA MOLIENDA	68
II.2-LIXIVIACIÓN DE COBRE A PARTIR DEL POLVO GENERADO POR LA MOLIENDA DE PLACAS DE CIRCUITOS IMPRESOS DE COMPUTADORAS	78
II.3-NATURALEZA DE LA REACCIÓN DE DESCOMPOSICIÓN DE LA JAROSITA DE TALIO EN MEDIO CaO.....	86
II.4-NATURALEZA DE LA REACCIÓN DE JAROSITA DE MERCURIO EN MEDIO NaOH.....	96
II.5-IMPACTO DEL AMBIENTE FISICOQUÍMICO DE LA MOLIENDA EN LA FLOTACIÓN DE UN MINERAL SULFUROSO.....	103

TÓPICO III: CIENCIAS DE LA TIERRA 110

III.1-MARCO GEOLÓGICO REGIONAL Y LITOLÓGICO DE LA ZONA ARQUEOLÓGICA DE HUAPALCALCO, TULANCINGO, HIDALGO.....	111
III.2-EMPLAZAMIENTO DE DIQUES MAGMÁTICOS Y SU INTERPRETACIÓN TECTÓNICA: EJEMPLOS EN ROCAS TERCIARIAS DE LA SIERRA DE PACHUCA	120
III.3-METALOGÉNESIS DE LA MINERALIZACIÓN TIPO IOCG RELACIONADA AL SKARN DEL DISTRITO MINERO LAS MINAS, ESTADO DE VERACRUZ	128
III.4-APLICACIÓN DE UNA PRAXIS DE INVESTIGACIÓN PARA MEJORAR LA CALIDAD DE LA ENSEÑANZA-APRENDIZAJE DE LA TERMODINÁMICA EN LA GEOLOGÍA	144
III.5-GEOLOGÍA DEL SISTEMA DE VETAS POLIMETÁLICAS DEL DISTRITO MINERO TAVICHE, ESTADO DE OAXACA.....	150
III.6- SISTEMA BIOTECNOLÓGICO PARA REDUCCIÓN DE CROMO (VI) EN AGUAS RESIDUALES	163

TÓPICO IV: MATERIALES CERÁMICOS Y COMPÓSITOS..... 175

IV.1-PROPIEDADES MAGNÉTICAS DE BiFeO ₃ OBTENIDO POR MECANOSÍNTESIS.....	176
IV.2-ESTRUCTURA CRISTALINA Y CARACTERIZACIÓN MAGNÉTICA DE Na _x Nd _{1-x} MnO ₃ OBTENIDA MEDIANTE MECANOSÍNTESIS.....	184
IV.3-ELABORACIÓN DE ELECTRODOS DE PASTA DE CARBONO PARA LA CARACTERIZACIÓN DE NABOTUBOS DE CARBONO DOPADOS CON BORO Y PLATA.....	191
IV.4-DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES ELÉCTRICAS DE BaTiO ₃ DOPADO CON Gd ³⁺	198

TÓPICO V: ELECTROQUÍMICA Y CORROSIÓN 205

V.1-REDUCCIÓN DE Fe PRESENTE EN ARCILLAS CAOLÍNICAS	206
V.2-DISEÑO Y EVALUACIÓN TERMODINÁMICA DE UN REACTOR ELECTROQUÍMICO PARA LA RECUPERACIÓN DE PLATA DE LOS RESIDUOS LÍQUIDOS DEL REVELADO DE RADIOGRAFÍAS.....	216
V.3-DISOLUCIÓN ANÓDICA Y ELECTRODÉPOSITO DE IRIDIO EN MEDIO ÁCIDO, PROVENIENTE DE BOQUILLAS DE HORNOS DE ARCO ELÉCTRICO	223
V.4- OXIDACIÓN ELECTROQUÍMICA DE Cu, Ni y Sn CONTENIDOS EN E-WASTE	231
V.5- ESTUDIO ELECTROQUÍMICO PRELIMINAR PARA LA OBTENCIÓN DE α-ALÚMINA A PARTIR DE CHATARRA DE ALUMINIO	237
V.6- CARACTERIZACIÓN ELECTROQUÍMICA DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA (AgNPS) OBTENIDAS MEDIANTE QUÍMICA VERDE	247
V.7-EMPLEO DE ELECTRODOS COMPOSITE DE PASTA DE CARBONO (EPC) / NANOPARTICULAS DE ORO PARA LA CUANTIFICACIÓN DE IBUPROFENO	255
V.8- CUANTIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN ELECTROQUÍMICA DE DICLOFENACO EN ELECTRODO COMPOSITE DE PASTA DE CARBONO Y NANOTUBOS DE CARBONO.....	264

III.6- SISTEMA BIOTECNOLÓGICO PARA REDUCCIÓN DE CROMO (VI) EN AGUAS RESIDUALES

SISTEMA BIOTECNOLÓGICO PARA REDUCCIÓN DE CROMO (VI) EN AGUAS RESIDUALES

Alejandra Tovar-Corona^{*}; O. Vázquez-Cuchillo; F.B. Moreno-Luna,
Diego Hernández-Tosca

^a Ingeniería en Biotecnología, UPMP, Puebla, Puebla.
alejandra.tovar@metropoli.edu.mx

^b Departamento de Ciencias Básicas, ITP, Puebla, Puebla.
odilon_vazquez_c@hotmail.com

^c Instituto Politécnico Nacional, SEPI-UPIITA, Gustavo A. Madero, México, D. F.
bersainbers@hotmail.com

* Autor de correspondencia: alejandra.tovar@metropoli.edu.mx

RESUMEN:

Debido a su toxicidad el Cr (VI) en aguas y sedimentos de ríos representa un serio problema de salud para las poblaciones que utilizan dichos afluentes, cuya exposición se relaciona con enfermedades tales como: retrasos en el desarrollo, diferentes tipos de cáncer, daño en riñones, e incluso, con casos de muerte [1, 2].

En el presente trabajo se describe la aplicación de un sistema bioreductor para la disminución de cromo hexavalente en aguas residuales, a través de un biofiltro compuesto por bagazo de *Agave potatorum* utilizado como soporte, extractos orgánicos polares ricos en ácido ascórbico, ácido cítrico y flavonoides, metabolitos con una alta capacidad antioxidante y el ligante *N*-donador Tris-(2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina, obtenido por química verde [3-5] y caracterizado por técnicas espectroscópicas de rutina: EM por impacto electrónico, IR y UV-Vis. El último componente presenta una importante actividad quelante sobre el ion Cr (VI) el cuál es reducido y adsorbido por el sistema de origen biotecnológico eliminándolo del agua con una eficiencia del 96%, evaluando los resultados por espectrofotometría UV-Vis.

Palabras Clave: Cromo (VI), biofiltro, quelante, antioxidantes, biotecnología

ABSTRACT

Due to its toxicity, the Cr (VI) in water and sediment of rivers represents a serious health problem for people who use these flowing, whose exposure is related to diseases such as delays in development, cases of different types of cancer, damage to kidneys, and even with cases of death [1, 2].

This paper describes the application of a system bioreductor for the decrease of hexavalent chromium in wastewater, through a bio filter composed of *Agave potatorum* fiber, polar organic extracts rich in ascorbic acid, citric acid and flavonoids, metabolites with a high antioxidant capacity and ligand *N*-donator Tris-(2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden) amino)ethyl)imine obtained by green chemistry [3-5] and characterized by spectroscopic techniques of routine: mass spectroscopy by electron impact, FT-IR and UV-Vis. The latter compound presents an important activity chelating over ion Cr (VI) that is reduced and absorbed by the biotechnology system on deleting it from the water with an efficiency of 95%, evaluating the results by UV-Vis spectrophotometry.

Keywords: Chrome (VI), bio filter, chelation, antioxidants, biotechnology.

1. INTRODUCCIÓN

La presencia de metales pesados en el medio ambiente es una fuente de contaminación y daño potencial para cualquier ser vivo, ya que debido a su alta estabilidad no pueden biodegradarse, por lo que sólo cambian de estado de oxidación y se combinan con otras sustancias, dando lugar a formas más tóxicas del metal por lo que los seres vivos son incapaces de bio-transformarlos (no se metabolizan) [6,7].

El cromo hexavalente, Cr (VI), es el contaminante principal en las aguas residuales provenientes de industrias metalúrgicas, galvanoplásticas y del cuero. Es carcinógeno y mutagénico, así como un agente altamente oxidante. Se difunde fácilmente en los suelos, ambientes acuáticos y a través de la piel [8-10].

La cuantificación del contenido de metales pesados se puede determinar en muestras de aire, suelo, agua, sedimentos y tejidos de organismos vivos a partir de técnicas espectrofotométricas. De acuerdo a los *Criterios Ecológicos de Calidad del Agua* (CE-CCA-001/89) los valores de Cr en agua permitidos en México son de 0.05 mg /L [5] por lo cual la concentración de dicho metal en la mayoría de cuerpos de agua supera el límite establecido [11].

Es debido a estas alarmantes cifras que en los últimos años las investigaciones se han centrado en desarrollar procesos para eliminar el cromo presente en aguas residuales industriales, entre los que podemos mencionar: intercambio iónico sobre resinas poliméricas, coagulación-floculación, adsorción sobre carbón activado y reducción; precipitación química y sedimentación [12-14]. En este sentido, la síntesis química de ligantes y el uso de reductores, pretende ser un aliado en el procesamiento y mejora en la calidad de aguas contaminadas con Cr (VI), disminuyendo considerablemente el impacto que tiene en la salud y medio ambiente [15-19].

En condiciones naturales el cromo se presenta casi siempre en forma trivalente y prácticamente todo el cromo hexavalente que existe es generado por las actividades humanas.

Las especies de Cr (VI) en solución acuosa son $[\text{Cr}_2\text{O}_7]^{2-}$, $[\text{CrO}_4]^{2-}$, $[\text{HCrO}_4]^{-}$ y su distribución depende del pH de la solución y de la concentración del metal [20]. Aunado a la actividad antropogénica normal, la extensa aplicación de este metal en la industria y manufactura ha permitido que sus niveles se eleven considerablemente [21,24]. Por otro lado, como resultado del proceso de reducción la especie de Cr (VI), se transforma a Cr^{3+} . Este catión, a un pH en condiciones ambientales precipita como hidróxido, $\text{Cr}(\text{OH})_3$. Este hidróxido suele formarse en estado coloidal, con lo que permanece en suspensión o bien se adhiere a otras partículas sólidas mayores, precipitando e incorporándose en el sedimento. No obstante, si el pH es menor a 5, el ion Cr^{3+} no precipita, manteniéndose en disolución. De las dos especies que se encuentran en la naturaleza, la trivalente es relativamente benigna, mientras que la hexavalente es tóxica [25,26]. El Cr (VI) es de naturaleza aniónica y no es fuertemente adsorbido por el sedimento o la materia particulada, por ello es más móvil que el Cr (III) y no es propenso a sedimentar. Tiene tendencia a reaccionar fuertemente con sustancias oxidantes, moléculas orgánicas normalmente y formar Cr (III). El cual tiene una fuerte tendencia a formar complejos estables con especies orgánicas o inorgánicas cargadas negativamente [27,28].

En este trabajo presentamos un biofiltro que se basa en el uso de la capacidad reductora de los extractos naturales obtenidos de la cascara de naranja dulce (*Citrus sinensis*) y la actividad quelante de un ligante orgánico, a partir del cual podemos disminuir las concentraciones de cromo tóxico (Cr hexavalente) en aguas residuales contaminadas.

2. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

2.1. Materiales y métodos.

Los espectros de IR fueron registrados en un aparato Nicolet FT-IR Magna 700 en pastillas de KBr y de polietileno. Los espectros de masas mediante la técnica de impacto electrónico IE fueron registrados con un espectrómetro JEOL JMS-SX 102A operado en el modo ion positivo a 70 eV, los espectros de masas FAB⁺ se registraron con un espectrómetro JEOL JMS AX505HA; los datos están expresados en unidades masa /carga (*m/z*). Los puntos de fusión fueron medidos utilizando un aparato Melt-Temp II y no están corregidos. Las reacciones fueron monitoreadas por cromatografía en placa fina, empleando cromatoplasmas analíticas de óxido de aluminio TLC60F₂₅₄ neutras de 0.54 mm de espesor. La extracción de la fase orgánica a partir del crudo de reacción se realizó mediante extracciones con acetato de etilo y agua tridestilada. La separación de las mezclas de reacción se efectuó mediante placa preparativa DC-Fertigplatten SIL G-100 UV₂₅₄, 1,0 mm. La placa preparativa se fue eluyendo con una proporción 7:3 de Hexano/Acetato de etilo, los cuales fueron previamente destilados.

2.2. Síntesis de base de Schiff L1 y preparación de solución ligante.

Se sintetizó el ligante polidentado *N*-donador mediante condensación agregando cinamaldehído con la amina primaria en una proporción estequiométrica 3:1 equivalentes en un matraz de bola, dejando en agitación durante 24 horas, posteriormente se hicieron lavados con agua destilada y extracciones con acetato de etilo [29-31]. La solución amarilla resultante fue secada sobre Na₂SO₄ anhidro. Por último, se dejó cristalizando en una mezcla AcOEt/Hexano 1:1, obteniendo cristales amarillos con un rendimiento de 96%. A partir del compuesto obtenido, se preparó una solución 3.10⁻³ M, utilizando 0.4g de ligante L1 Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden) amino) etil)imina y aforando a 250 ml con acetona como disolvente.

2.3. Desarrollo de biofiltro a partir de *Agave potatorum* y *Citrus sinensis*

La naranja dulce (*Citrus sinensis*) fue obtenida de manera comercial, seleccionando las frutas que presentaran color característico, que no presentaran manchas o abolladuras en la cascara.

Se pesaron 150 gr de cascara de naranja, se colocaron en el cartucho de extracción del equipo Soxhlet y se adicionaron 300 mL de etanol absoluto. Se colocó a reflujo con un tiempo de reacción de 3 horas con agitación. Una vez obtenido el extracto se concentró hasta obtener un volumen final de 50 mL utilizando vacío a presión reducida.

Las muestras de *Agave potatorum* fueron hojas basales obtenidas de plantas cultivadas de 8 años de edad. Obtenidas las hojas (100gr), se procedió a lavarlas cuidadosamente con agua tridestilada hasta obtener hojas libres de polvo, posteriormente se trituró hasta alcanzar una fase sólido líquido para ser posteriormente separada por filtración, la fase sólida (fibra) se deshidrató por convección natural para su posterior uso en la extracción. Posterior a esto se procedió a un secado en estufas a 80°C por 24hrs y la fibra seca se combinó con 50mL de la solución quelante-bioreductora, generando una masilla que fue empaquetada en una columna de vidrio.

Los 50mL de solución quelante-bioreductora fue obtenida utilizando distintas cantidades del extracto orgánico (0-25mL), 25mL del ligante L1 y completando la solución con agua tridestilada (0-25mL) hasta alcanzar un volumen constante de 50mL. Cada prueba se realizó por triplicado para garantizar la repetitividad de los resultados.

2.4. Técnica colorimétrica para cuantificación de cromo hexavalente [32].

Se pesaron 250 mg de difenilcarbazida y se disolvió en 50 mL de acetona. La solución se almacenó en frascos de color ámbar con tapa y recubierta de teflón; esta disolución es transparente al momento de prepararla, después toma un color amarillo claro. Se secó dicromato de potasio en horno a 105°C por

1hr., dejando enfriar en el desecador. Posteriormente se pesó 141,4 mg de dicromato de potasio, se disuelve con agua y se afora a 100mL. Un mililitro de esta disolución es equivalente a 500,0 µg de Cr (VI). Se adicionó una alícuota de 1 mL de la disolución madre de cromo (VI) a un matraz volumétrico de 100 mL y se aforó con agua destilada. 1 mL de esta disolución equivale a 5,0 µg de Cr (VI).

La muestras problema fue ajustada a pH<2 con ácido sulfúrico 0.2 N, se tomó una alícuota de 100 ml y se agregan 2 ml de la disolución de difenilcarbazida, se mezcla y se deja reposar por 10 min para desarrollar el color completamente.

2.5. Curva de calibración.

Se midieron volúmenes de disolución estándar de Cr (VI) 5,0 µg/mL entre 2,0 mL y 20,0 mL. de esta disolución con 10 disoluciones para obtener estándares en el intervalo de 10 ppm a 100 ppm de Cr (VI), en matraces aforados de 100 mL. Después se transfirieron a matraces Erlenmeyer de 250 mL; para agregar ácido sulfúrico 0,2 N hasta llegar pH<2 y se siguió el procedimiento que se indica a la muestra para el desarrollo de color, posteriormente se transfirió una alícuota de cada estándar a una celda de cuarzo de 1cm y se midió su absorbancia en el espectro UV-VIS a 540nm.

2.6. Evaluación quelante y bioreductora.

Con la finalidad de evaluar la capacidad quelante y bioreductora de nuestros distintos componentes, llevamos a cabo tres experimentos (cada uno por triplicado), en el primero de ellos (Experimento A) se busca conocer la proporción metal-ligante ideal para poder obtener la mayor cantidad de complejos, suponiendo una unión 1:1 entre cada molécula orgánica y cada uno de los iones metálicos Cr⁶⁺. Sin embargo, al tratarse de un ligante polidentado, se puede pensar en que dicha proporción cambie.

Posteriormente debido a los altos volúmenes (100mL) de solución problema y hasta 70mL de solución orgánica utilizados en los primeros experimentos de decidieron realizar procedimientos de prueba más alineados con la química verde (señalado como B) con un modelo a escala manejando volúmenes máximos de 5mL.

Por último, se integró el ligante orgánico, al sistema bioreductor y el bagazo de *Agave potatorum* para evaluar la eficacia del sistema biotecnológico desarrollado para la adsorción-reducción del metal tóxico (experimento C).

Experimento A.

Se prepararon soluciones estándar de Cr (VI) con un volumen final de 100 ml, a las cuales se les agregó el ligante L1 en las proporciones descritas en la tabla 1. Estas soluciones se hicieron reaccionar de acuerdo a la técnica antes mencionada para el desarrollo de color y se leyeron a los 10 minutos en una celda de cuarzo a 540 nm.

Tabla1: Componentes de aguas modelo experimento A

Cr (VI) [100ppm]	SOLUCIÓN L1	Difenilcarbazida
100 ml	0 ml	2ml
33,3ml	66,6ml	2ml
50,0ml	50,0ml	2ml
66,6ml	33,3ml	2ml
45,0ml	25,0ml	2ml

Experimento B.

Se realizó un segundo experimento alineándonos a la química verde, preparando soluciones modelo a escala con 5 ml como volumen final, se tomaron alícuotas de la disolución estándar de Cr (VI) y de la solución de ligante con las proporciones señaladas en la tabla 2. A cada una de las muestras se les hicieron

reaccionar de acuerdo a la técnica para el desarrollo de color y se leyeron en celda de cuarzo a 540 nm a los 10 minutos. Se dejan reposar las soluciones 24 hrs, se agitan por 10 min y se repite la lectura

Tabla2: Componentes de aguas modelo experimento B

Cr (VI) [100ppm]	LIGANTE L1	DIFENILCABAZIDA
5,0ml	0 ml	0,1ml
4,5 ml	0,5ml	0,1 ml
4,0 ml	1,0 ml	0,1 ml
3,5 ml	1,5 ml	0,1ml
3,0 ml	2,0 ml	0,1 ml
2,5ml	2,5 ml	0,1 ml
2,0ml	3,0 ml	0,1 ml
1,5ml	3,5ml	0,1 ml
1,0ml	4,0ml	0,1 ml
0,5ml	4,5ml	0,1 ml

Experimento C

La mezcla preparada según la descripción del apartado 2.3 y según las proporciones señaladas en la tabla 3, se dejó secar a temperatura ambiente y fue colocada en columnas cromatográficas de vidrio.

Sobre la misma se hicieron pasar 50mL de una solución estandar de Cromo (VI) con una concentración de 100ppm, la cual fue recuperada y tratada de acuerdo a la norma correspondiente para conocer su concentración por espectrofotometría UV-Vis.

Tabla 3: Proporciones de mezcla quelante-bioreductora

No.	Solución Ligante L1	Extracto orgánico (mL)	H2O (mL)
1	25 mL	0	25
2		5	20
3		10	15
4		15	10
5		20	5
6		25	0

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. Ligante L1 Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden) amino)etil)imina

El ligante L1 se obtuvo con un rendimiento del 96% como un sólido cristalino amarillo con p.f=85°C en su espectroscopia FT-IR se encuentran bandas de absorción con frecuencias de 1666.49 cm^{-1} (ν) C=N; 1624.752 cm^{-1} (ν) (C=C), 1115.654 cm^{-1} (ν) (C-N); 680.10 cm^{-1} (ν) (C-H) fuera de plano. En el espectro de masas por impacto electrónico se observa el ion molecular del compuesto $m/z = M^+ + H_2O = 501$ y confirmando la fórmula molecular propuesta $C_{33}H_{36}N_4$. Los picos con relación m/z 258, 155, 90, 31, 27, corresponden a los fragmentos ($M^+ - 243$) $C_{15}H_{22}N_4^+$, (-346) $C_7H_{15}N_4^+$, ($M^+ - 411$) $C_7H_6^{2+}$, ($M^+ - 470$) $C_2H_6^+$, ($M^+ - 474$) $C_2H_2^{4+}$. Estos parámetros permiten determinar cuantitativamente los componentes del ligante sintetizado *N*-donador, los cuales representan la abundancia de los diferentes tipos de iones en función de la relación masa/carga de cada uno de ellos presentes en el sistema orgánico.

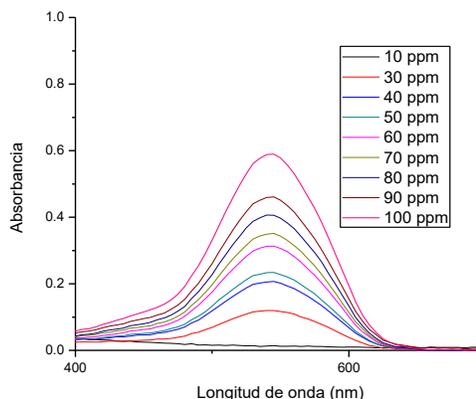
3.2. Curva de calibración

Se realizaron diluciones con diferentes concentraciones de cromo hexavalente que fueron desde aquella que tenía 10ppm hasta la que su concentración era de 100ppm de dicho metal, posteriormente se sometió a la técnica de desarrollo de color para realizar las lecturas de absorbancia en el espectrofotómetro UV-

VIS, después de hacer las lecturas de absorbancia a 540nm observadas en la tabla 4, este grafico no ayudo como referencia para determinar la cantidad de Cr (VI) presente las siguientes muestras estudiadas [32].

Tabla 4: Curva de calibración A_{540nm}

[Cr ⁶⁺]ppm	A _{10 min}
10	0.0128
20	0.0526
30	0.1194
40	0.2054
50	0.2335
60	0.3123
70	0.3492
80	0.4064
90	0.4592
100	0.5882



Espectro 1. UV-VIS curva de calibración.

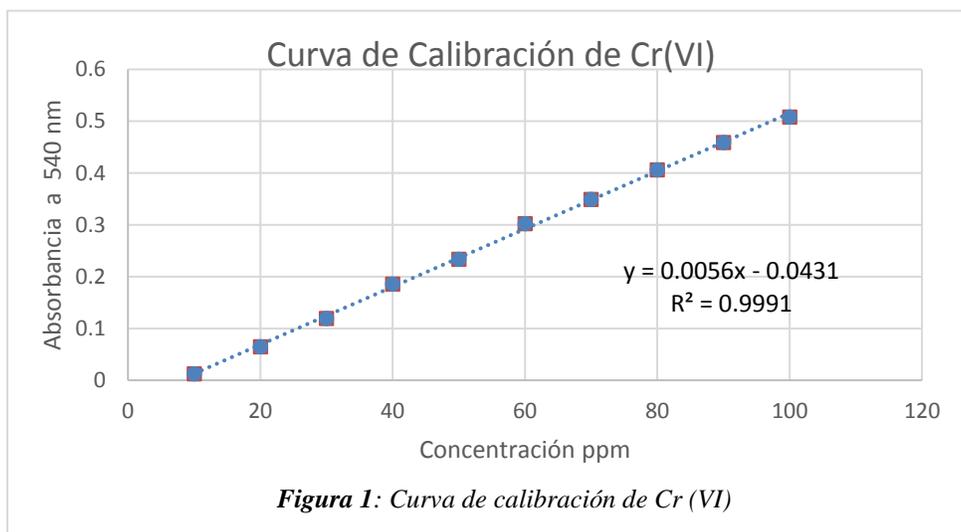
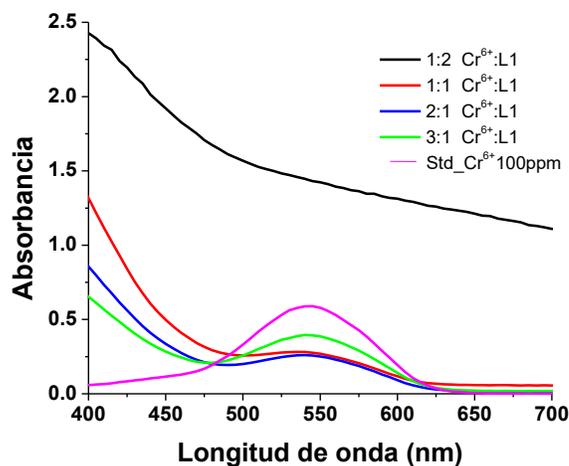


Figura 1: Curva de calibración de Cr (VI)

3.3. Experimento A. En el espectro 2 verificamos que el ligante sintetizado tiene la capacidad de reducir en diferentes proporciones la cantidad de Cr(VI) gracias al efecto quelante que presenta, formando un complejo metal-ligante, el cual macroscópicamente se puede observar en forma de precipitado. Las muestras que contenían una mayor cantidad de ligante respecto al Cr, no mostraron lectura a 540nm, puesto que prevalecía la cantidad de ligante y el cromo hexavalente es atrapado en su totalidad; mientras que aquellas en las que había una cantidad menor de ligante contra la cantidad de Cr (VI) (muestras 2:1 y 3:1), mostraron una reducción considerable, siendo aquella que contiene 2:1 equivalentes de Cr (VI):L1 (curva color azul). La efectividad de la actividad quelante se



Espectro 2: Espectro UV-VIS experimento A

evaluó con base en la curva de calibración correspondiente de acuerdo a la norma NMX-044, observando una disminución del ion hexavalente hasta en un 87%, esto nos permite verificar no sólo la eliminación del ion libre en aguas modelo sino la proporcionalidad quelante superior a la proporción 1:1 comprobando que nuestro ligante tiene un mayor efecto quelante que el esperado.

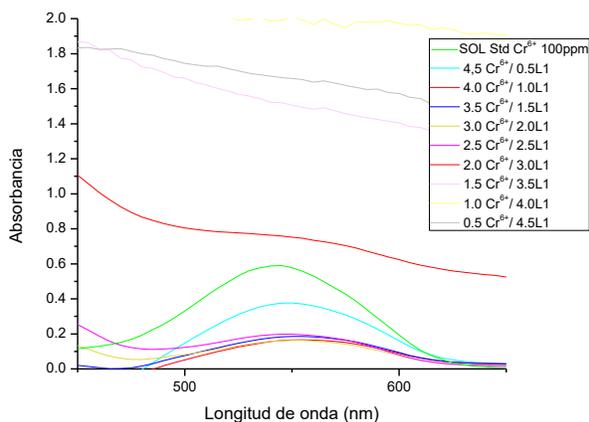
3.3. Experimento B.

Se trabajaron disoluciones a escala con un volumen final de 5ml apegándonos al fundamento del experimento A. Repitiendo la metodología, se tiene una dilución estándar 100 ppm de Cr (VI), otra cuya cantidad de cromo es la misma al ligante, así como en las que hay un exceso de L1 y otras donde prevalece en mayor proporción el Cr (VI) con respecto al ligante (Tabla 4). La curva de color verde es nuestro estándar con una concentración de 100ppm de Cr VI, las muestras que están bajo esta curva son aquellas donde existe una concentración igual o menor de ligante con respecto al metal, en las cuales se observa una disminución en la concentración del Cr hexavalente. Por lo tanto se reitera que la capacidad quelante de metales pesados del ligante Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina L1, es realmente efectiva ya que se reduce hasta en un 87%, gracias a la formación de quelatos que precipitan y a los cuales posteriormente se les puede hacer un diferente tratamiento de purificación para el control de contaminación por dicho metal.

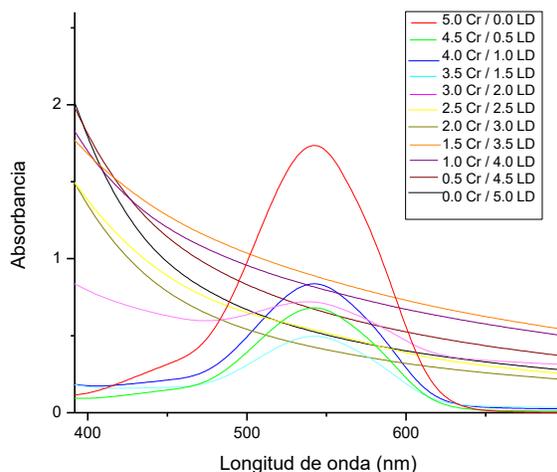
Tabla 5: Absorbancias T_{10min} y T_{24hrs} experimento B

No.	A $\lambda=540nm$ 10 min	A $\lambda=540nm$ 24 hrs.
1	0,588	0,588
2	0,368	0,314
3	0,155	0,199
4	0,177	0,260
5	0,157	0,204
6	0,195	0,225
7	0,764	0,149
8	1,522	0,053
9	1,986	0,373
10	1,671	0,106

Las muestras 7, 8, 9, 10 contienen un exceso de ligante, por lo tanto ya no se observa en la presencia de Cr (VI) en estas aguas modelo ya que prevalece L1. Los agentes quelantes poseen diversas características, como la gran estabilidad en la formación de complejos sin toxicidad partiendo de elementos que si son tóxicos como el Cr (VI), por tal razón se decidió dejar en reposo durante 24 horas estas aguas modelo para cerciorar que se cumpla dicha propiedad, pasado este tiempo se realizaron las lecturas de absorbancia (espectro 4).



Espectro 3: UV-VIS Experimento B ($t=10$ min).

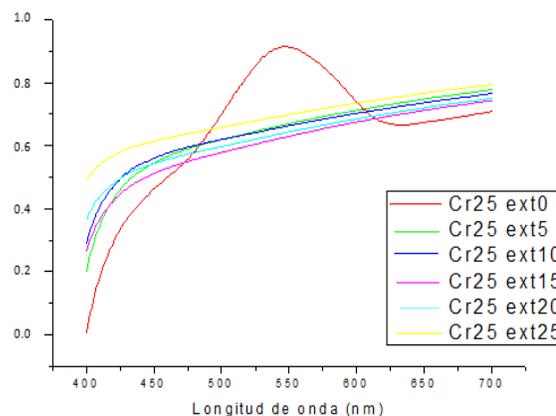


Espectro 4: UV-VIS Experimento B ($t=24hrs$).

3.4. Experimento C

La solución pasada por el biofiltro no presenta la absorción característica a los 540nm lo que corrobora la eliminación cuantitativa del ion Cr^{6+} , el sistema estudiado mostró propiedades de adsorción comparables a las de la alúmina comercial (97%) de eliminación de Cr(VI) [33,34]. En todas las repeticiones, la columna que mostró la menor absorbancia es la que contiene la mezcla 4: 25ml de ligante L1/ 15 mL de extracto bioreductor/ 10mL de H_2O soportados sobre el adsorbente de *Agave portatorum* (ver tabla 3), obteniendo una efectividad de reducción- adsorción hasta del 96%, lo que nos permite estandarizar las proporciones en nuestro biofiltro.

Cabe mencionar que el color natural de la solución bioreductora genera un color característico (café) en la solución resultante por lo que se observa una absorbancia interferente típica. Por otro lado el espectro obtenido nos muestra la gran estabilidad del complejo formado por el ligante L1 y el Cr (VI), al igual que en el experimento A, donde en cada disolución se muestra la reducción en la concentración de Cr hexavalente, al dejar reaccionar por mayor tiempo nuestros componentes en estudio se tuvo una mayor interacción entre los pares electrónicos libres de los nitrógenos presentes en el ligante Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina con el ácido de Lewis (Cr(VI)) y una reducción casi total en la concentración de cromo hexavalente.



Espectro 5. UV-Vis experimento C

que en el experimento A, donde en cada disolución se muestra la reducción en la concentración de Cr hexavalente, al dejar reaccionar por mayor tiempo nuestros componentes en estudio se tuvo una mayor interacción entre los pares electrónicos libres de los nitrógenos presentes en el ligante Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina con el ácido de Lewis (Cr(VI)) y una reducción casi total en la concentración de cromo hexavalente.

4. CONCLUSIONES

El presente estudio permitió establecer el enorme potencial de un producto biotecnológico en la adsorción/eliminación de Cr(VI) en medio acuoso, en concentraciones de metal equivalentes a las halladas en aguas residuales provenientes de industrias en México. Este biofiltro se desarrolló a partir de la bagazo de *Agave potatorum* como adsorbente, extracto etanólico de *Citrus sinensis* y el ligante orgánico Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina el cual fue sintetizado mediante procesos sustentables y se caracterizó con métodos espectrofotométricos infrarrojo, ultravioleta-visible y espectrometría de masas. Al evaluar la actividad quelante de dicho ligante frente a Cr (VI) en aguas modelo de concentración conocida mediante el seguimiento por espectrofotometría ultravioleta-visible, de acuerdo a la NORMA OFICIAL MEXICANA NMX-AA-044-SCFI-2001 se obtuvo una efectividad de hasta el 96% en la remoción de Cr (VI). Además, se integró con un adsorbente orgánico realizado a partir de bagazo de *Agave potatorum* y el extracto etanólico obtenido a partir de *Citrus sinensis*, dicho sistema además de la propiedad quelante tiene adicionado un sistema bioreductor natural convirtiendo al ion tóxico Cr(VI) en iones biocompatibles, asegurando no solo el saneamiento acuoso sino la disminución en la toxicidad de los sedimentos.

AGRADECIMIENTOS

Este proyecto fue desarrollado gracias al financiamiento PRODEP DSA/103.5/15/10800 y de la Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla, así como con la colaboración del Instituto Tecnológico Nacional (Campus Puebla).

REFERENCIAS

[1] Oze, C., Bird, D. K., & Fendorf, S. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2013, 104(16), 6544-6549.

- [2] Martínez, R. M. Q., Chacón, G. S., Arias, H. R., Prieto, J. R. E., Licón, C. H., & Acosta, J. C. Evaluación de parámetros físico químicos y contenido de metales en sedimentos de la Laguna de Bustillos en Chihuahua, México. Investigación no publicada, 2011.
- [3] Anastas, P. a. (2000). Green Chemistry: Theory and Practice. *J. C. Green Chemistry: Theory and Practice, New York, Oxford University*, pp. 30-36.
- [4] Newman Stephen G., Jensen Klays F. *Green Chem.*, 2013, 15, 1456-1472
- [5] Clark James, Sheldon Roger, Raston Colin, Poliakoff Martyn, Leitner Walter, *Green Chem.*, 2014,16, 18-23
- [6] Gutiérrez, R. L., Rubio-Arias, H., Quintana, R., Ortega, J. A., & Gutierrez, M. *International journal of environmental research and public health*, 2008, 5(2), 91-98.
- [7] Reyes-Gutiérrez, L. R., Romero-Guzmán, E. T., Olmos-Salinas, M. G., & Rodríguez-Castillo, R. *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, 2009, 26(1), 104-116.
- [8] Fiedler, S., Siebe, C., Herre, A., Roth, B., Cram, S., & Stahr, K., *Water, air, and soil pollution*, 2009, 197(1-4), 35-47.
- [9] Rubio-Arias, H., Quintana, C., Jimenez-Castro, J., Quintana, R., & Gutierrez, M. *International journal of environmental research and public health*, 2010, 7(5), 2071-2084.
- [10] Rubio-Arias, H., Rey, N. I., Quintana, R. M., Nevarez, G., & Palacios, O. *International journal of environmental research and public health*, 2011, 8(6), 2386-2400. 6
- [11] Villalobos-Aragón, A., Ellis, A. S., Armienta, M. A., Morton-Bermea, O., & Johnson, T. M. *Applied Geochemistry*, 2012, 27(9), 1783-1794.
- [12] Steffy, D. A., Nichols, A. C., Morgan, L. J., & Gibbs, R. *Water, Air, & Soil Pollution*, 2013, 224(11), 1-11.
- [13] Wise Jr, J. P., Wise, J. T., Wise, C. F., Wise, S. S., Gianios Jr, C., Xie, H., & Wise Sr, J. P. *Environmental science & technology*, 2015, 48(5), 2997-3006.
- [14] Cai, Y., Rooker, J. R., Gill, G. A., & Turner, J. P. *Journal of Fisheries and Aquatic Sciences*, 2007, 64(3), 458-469.
- [15] Guentzel, J. L., Portilla, E., Keith, K. M., & Keith, E. O. *Science of the Total Environment*, 2007, 388(1), 316-324.
- [16] Trefry, J. H., Trocine, R. P., McElvaine, M. L., Rember, R. D., & Hawkins, L. T. *Environmental geology*, 2007, 53(2), 375-385.
- [17] García-Hernández, J., Cadena-Cárdenas, L., Betancourt-Lozano, M., García-De-La-Parra, L. M., García-Rico, L., & Márquez-Farías, F. *Toxicological & Environmental Chemistry*, 2007, 89(3), 507-522. 7
- [18] Lewis, M., & Chancy, C. *Chemosphere*, 2008, 70(11), 2016-2024.
- [19] Gutiérrez-Galindo, E. A., Casas-Beltrán, D. A., Muñoz-Barbosa, A., Daesslé, L. W., Segovia-Zavala, J. A., Macías-Zamora, J. V., & Orozco-Borbón, M. V. *Bulletin of environmental contamination and toxicology*, 2008, 80(2), 123-127.
- [20] DeLaune, R. D., Devai, I., Hou, A., & Jugsujinda, A. *Soil & Sediment Contamination*, 2008, 17(2), 98-106.
- [21] Osuna-Martínez, C. C., Páez-Osuna, F., & Alonso-Rodríguez, R. *Bulletin of environmental contamination and toxicology*, 2012, 85(3), 339-343.
- [22] Shah, A. Q., Kazi, T. G., Baig, J. A., Afridi, H. I., Kandhro, G. A., Khan, S., & Wadhwa, S. K. *Food and Chemical Toxicology*, 2010, 48(6), 1550-1554.
- [23] Leal-Acosta, M. L., Shumilin, E., Mirlean, N., Sapozhnikov, D., & Gordeev, V. *Bulletin of environmental contamination and toxicology*, 2010, 85(6), 609-613.
- [24] Macías Medrano, R., Hinojosa Reyes, L., Hernandez-Ramirez, A., & Acuna-Askar, K. *Journal of the Chilean Chemical Society*, 2010, 55(4), 486-490.
- [25] Trasande, L., Cortes, J. E., Landrigan, P. J., Abercrombie, M. I., Bopp, R. F., & Cifuentes, E. *Environmental Health*, 2010, 9(1),
- [26] Páez-Osuna, F., Calderón-Campuzano, M. F., Soto-Jiménez, M. F., & Ruelas-Inzunza, J. *Marine pollution bulletin*, 2011, 62(6), 1320-1323.
- [27] Evan P. Beaumier , Brennan S. Billow , Amrendra K. Singh , Shannon M. Biros and Aaron L. Odom *Chem. Sci.*, 2016, 7, 2532-2536
- [28] Jie Liu, Yuan-Ye Bao, Ye Liu, Wei-Min Ren, Xiao-Bing Lu, *Polym. Chem.*, 2013, 4, 1439-1444
- [29] Guo, B. L.-J.-G.-P.-Y. *Inorganica Chimica Acta*, 2012, 392, 4987-4994.
- [30] Bao-Lin Liu, Yan-Xia Wang, Fan-Hong Kong, Ruo-Jie Tao, *Inorganica Chimica Acta*, 2012, 392,469-472
- [31] Kusañ Alomar, Vincent Gaumet, Magali Allain, Pascal Richomme, Gilles Bouet, *Inorganica Chimica Acta*, 2012, 433-439
- [32] CONAGUA, *Norma Mexicana NMX-AA-044-SCFI-2014 Análisis de agua, medición de cromo hexavalente en aguas naturales, salinas residuales y residuales tratadas-Método de Prueba*, 2014.
- [33] Vargas-Nieto C., Carriazo J.G., Castillo E., *Ing. Investig.*, 2011, 31,154-162.
- [34] Glorias-García F., Arriaga-Merced J.M., Roa-Morales G., Varela-Guerrero V., Barrera-Díaz C.E., Bilveu B., *Journal on Industrial and Engineering Chemistry*, 2014, 20, 2477-2483

Revista

Latinoamericana de Química



ISSN 0370-5943

SUPLEMENTO ESPECIAL - 2015

REVISTA

LATINOAMERICANA DE QUÍMICA

EDITOR

Dr. Andrés Navarrete

The Revista Latinoamericana de Química is an international Journal. All manuscripts submitted are subject to peer review. Expert scientists in the subject areas being treated will evaluate all manuscripts for validity of all experimental procedure, originality, significance and appropriateness to the journal.

La Revista Latinoamericana de Química es una publicación internacional. Todos los manuscritos sometidos son sujetos a revisión. Científicos expertos en las áreas tratadas evaluarán todos los manuscritos en cuanto a la validez de los procedimientos experimentales, originalidad, importancia y adecuación para la Revista.

Revista Editada por:

MIXIM

Laboratorios Mixim, S.A. de C.V.

Calle Jardín Sur No. 6, Apertado Postal 8,

Neuquápan de Juárez, Estado de México, 58000, México

La revista actualmente está incluida en las siguientes bases de datos: Chemical Abstract, Medline, Biosis, ERSO, OVID, PERIODICA, Cambridge Scientific Information, NAPPALEPT, Ulrich's International Periodicals Directory, Alexander Marketing Services Inc., University of California, Science Library Services, entre otras.

MÉXICO 2015

12-JA-BT DESARROLLO DE UN ABSORBENTE DE Cr (VI) DERIVADO DE LA CANELA (*Cinnamomum aromaticum*) Y SU APLICACIÓN EN EL TRATAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS

Esmeralda M. Sánchez-González¹, J. Jaime Vázquez-Bravo², Jorge E. Zamora-Castro², Rodolfo Alfredo Mena-López², Alejandra Tovar-Corona^{*1,2}. ¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias Químicas. ²Universidad Politécnica de Puebla, Ingeniería en Biotecnología. Correo-E: alejandra.tovar@upmp.edu.mx

Debido a su toxicidad la presencia de Cr (VI) en aguas representa un serio problema de salud para las poblaciones que se sirven de dichos afluentes, cuya exposición está relacionada con problemas como: retrasos en el desarrollo, varios tipos de cáncer, daños en los riñones, e incluso muerte. Lo cual implica disminución de la capacidad productiva de los habitantes y desde luego repercusiones económicas a nivel local y nacional.

En este trabajo se desarrolló un sistema absorbente de cromo (VI), sintetizado por química verde, a partir de la condensación nucleofílica del cinamaldehído, aceite esencial de la canela (*Cinnamomum aromaticum*) y la poliamina primaria *Tris* (2-aminoetil) amina, generando un ligante polidentado de tipo base de Schiff. El cual se caracterizó por espectroscopia de rutina y se evaluó su actividad quelante frente a Cr(VI) en aguas modelo, siguiéndolo por espectrofotometría UV-Vis, obteniéndose una efectividad del 96% en la remoción de dicho metal. Los resultados confirman que una de las formas más eficientes de atrapar cromo (VI) es a través de ligantes orgánicos que permitan “anclar” al metal por medio de especies donadoras de electrones, formando en consecuencia complejos metálicos, estables y de fácil remoción; para su posterior uso en el tratamiento de efluentes de diferentes industrias como es la metal mecánica o mineras, representando una operación de bajo costo, altamente efectiva y sustentablemente viable. Se concluye que el uso de ligantes orgánicos derivado de la canela (*Cinnamomum aromaticum*) representa una alternativa de bajo costo, altamente efectiva y viable sustentablemente para el tratamiento de efluentes industriales y/o mineros contaminados con Cr(VI).

1. Gang Wang, Qing Chang, Xiaoting Han, Mingyue Zhang. *Journal of Hazardous Materials* (2013) 248, 115– 121 2. Dongyin Chang, Tianhu Chen, Haibo Liu, Yunfei Xi, Chengsong Qing, Qiaoqin Xie, Ray L. Frost. *Chemical Engineering Journal* (2014) 244, 264-272.

Desarrollo de un absorbente de Cr (VI) derivado de la canela (*Cinnamomum aromaticum*) y su aplicación en el tratamiento de aguas contaminadas.

Sánchez-González Esmeralda M.¹, Vázquez-Bravo J. Jaime², Zamora-Castro Jorge E.², Mena-López Rodolfo Alfredo², Tovar-Corona Alejandra^{*1,2}

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias Químicas. ²Universidad Politécnica de Puebla, Ingeniería en Biotecnología. Correo-E: alejandra.tovar@upmp.edu.mx

Debido a su toxicidad la presencia de Cr (VI) en aguas representa un serio problema de salud para las poblaciones que se sirven de dichos afluentes, cuya exposición está relacionada con problemas como: retrasos en el desarrollo, varios tipos de cáncer, daños en los riñones, e incluso muerte. Lo cual implica disminución de la capacidad productiva de los habitantes y desde luego repercusiones económicas a nivel local y nacional.

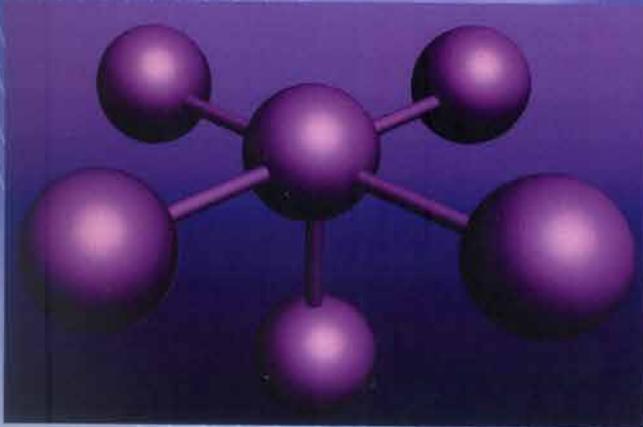
En este trabajo se desarrolló de un sistema absorbente de cromo (VI), sintetizado por química verde, a partir de la condensación nucleofílica del cinamaldehído, aceite esencial de la canela (*Cinnamomum aromaticum*) y la poliamina primaria *Tris* (2-aminoetil) amina, generando un ligante polidentado de tipo base de Schiff. El cual se caracterizó por espectroscopia de rutina y se evaluó su actividad quelante frente a Cr(VI) en aguas modelo, siguiéndolo por espectrofotometría UV-Vis, obteniéndose una efectividad del 96% en la remoción de dicho metal. Los resultados confirman que una de las formas más eficientes de atrapar cromo (VI) es a través de ligantes orgánicos que permitan “anclar” al metal por medio de especies donadoras de electrones, formando en consecuencia complejos metálicos, estables y de fácil remoción; para su posterior uso en el tratamiento de efluentes de diferentes industrias como es la metal mecánica o mineras, representando una operación de bajo costo, altamente efectiva y sustentablemente viable. Se concluye que el uso de ligantes orgánicos derivado de la canela (*Cinnamomum aromaticum*) representa una alternativa de bajo costo, altamente efectiva y viable sustentablemente para el tratamiento de efluentes industriales y/o mineros contaminados con Cr(VI).

1. Gang Wang, Qing Chang, Xiaoting Han, Mingyue Zhang. *Journal of Hazardous Materials* (2013) 248, 115– 121 2. Dongyin Chang, Tianhu Chen, Haibo Liu, Yunfei Xi, Chengsong Qing, Qiaoqin Xie, Ray L. Frost. *Chemical Engineering Journal* (2014) 244, 264-272.

ISSN: 1870-056X

Revista CiBiyT

Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología
Publicación de difusión científica e investigación multidisciplinaria



Simulación y control de la
deshidratación de etanol

mediante

destilación extractiva

utilizando

Unisim®

Año XII, número 35, septiembre-diciembre de 2017

Costo de recuperación: \$ 50.00 M.N.

Presentación

Este número de la Revista CiBlyT está dedicado al 6º *Simposio Nacional de Ingeniería Química y Bioquímica Aplicada (SNIQBA)*, organizado por los Cuerpos Académicos *Fluidos Complejos, Procesos Químicos y Sustentabilidad*, y *Recursos Naturales, Procesos Químicos y Medio Ambiente* de la Universidad Autónoma de Tlaxcala, también organizan los Cuerpos Académicos *Desarrollo de Materiales y Procesos Químicos* de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, *Matemáticas Aplicadas para Análisis de Procesos* de la Universidad Veracruzana. Asimismo, se cuenta con la co-organización del Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos, A. C., Sección Tlaxcala y el Centro de Investigación en Biotecnología Aplicada del Instituto Politécnico Nacional.

El SNIQBA 2017 se desarrolla en el marco del «Año Internacional del Turismo Sostenible para el Desarrollo». En el documento final de la cumbre del 2005 de la Organización de las Naciones Unidas, se definen los tres componentes del desarrollo sostenible, que son el desarrollo económico, el desarrollo social y la protección del medio ambiente, como «pilares interdependientes que se refuerzan mutuamente». En este sentido, la Ingeniería Química y la Ingeniería Bioquímica son las ramas de la Química encargadas del diseño, operación e innovación tecnológica de los procesos químicos y bioquímicos, basados en la optimización del uso de energía y en el desarrollo de procesos químicos

sustentables. Para tales efectos, es necesario el desarrollo de materiales avanzados, tales como los materiales híbridos y livianos, materiales capaces de almacenar y recuperar energía, al mismo tiempo que los procesos de elaboración puedan ser orientados hacia una producción más sostenible y eficiente en recursos y energía. Además, se debe favorecer la reutilización de los productos y la obtención de subproductos de mayor valor agregado, e impulsar el uso de materias primas a partir de origen biológico.

El SNIQBA nace en el año 2012 con el objetivo de convertirse en un espacio para formar redes de colaboración entre los Cuerpos Académicos de las diversas áreas de la Ingeniería Química y la Ingeniería Bioquímica, y se ha convertido en un punto de encuentro entre docentes, investigadores y estudiantes, donde se difunden y discuten los resultados más recientes de las investigaciones realizadas en cada una de sus Instituciones. También, se promueve el contacto entre estudiantes de los distintos niveles educativos con profesionistas, como una estrategia para garantizar la calidad de la educación y fomentar el desarrollo de la investigación e innovación.

A nombre del Comité Organizador, agradezco a los docentes e investigadores de las instituciones participantes y a todos los asistentes que mantienen vivo este evento, el cual va creciendo y consolidándose.

Dra. Lorena Farías Cepeda

Revista CiBlyT
Directorio editorial

Arnulfo Sánchez Cortés
Director y Editor

Ivonne Ilhuicatzí Cortés
Coordinador Editorial

Roberto Carlos Cruz Becerril
Coordinador de Arbitraje

Silvia Tomasa Rivera del Ángel
Asesora Editorial

José Botello Hernández
Coordinador de Diseño Gráfico y Edición

María Isabel Silva Aldrete
Corrección y Revisión de Textos

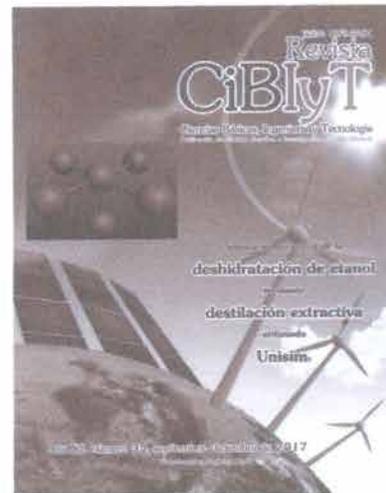
María de los Ángeles Patiño Dorantes
Denise Ivonne González Salcedo
Traductoras

Revista CiBlyT está indizada en Latindex

Revista CiBlyT, septiembre-diciembre de 2017, año 12, número 35, es una publicación cuatrimestral de difusión científica e investigación multidisciplinaria, fundada en 2004. Editada por Arnulfo Feliciano Sánchez Cortés. Mariano Matamoros 702, Col. Centro, Apizaco, Tlax. C. P. 90300, Tel: (01 241) 417 58 44, e-mail: ciblyt@hotmail.com y ciblyt@gmail.com.

Reserva de Derechos de uso exclusivo de título otorgado por el INDAUTOR: 04-2007-090509361300-102. ISSN: 1870-056X, con Licitud de Título y Licitud de Contenido en trámite. Impresa por Digitimagen, Esmeralda 501, San Luis Apizaquito, Apizaco, Tlax. C.P. 90401, Tel: (01 241) 417 72 28. Este número se terminó de imprimir el 30 de septiembre de 2017 con un tiraje de 1,000 ejemplares.

El material de investigación publicado es original e inédito en las áreas de Ingeniería, de Ciencias Sociales y de Ciencias Exactas. La **autorización** para la publicación de los artículos es **responsabilidad exclusiva de los autores**. Cada artículo es propiedad intelectual de su autor(es), así como la institución de procedencia del autor(es) es propietaria del resultado de esas investigaciones. Las opiniones expresadas por los autores no reflejan la posición del editor. Se podrá autorizar solo la reproducción parcial de los contenidos para fines académicos y sin fines de lucro con previa autorización del editor y con la mención de la fuente. Los requisitos de publicación aparecen en cada número publicado.



Fotomontaje realizado por la Revista CiBlyT
<http://photos.demandstudios.com/getty/article/171/211/92841084.jpg>
<http://elsistema.com.ua/assets/media/2.jpg>

Agradeceremos sus comentarios y sugerencias a:
ciblyt@hotmail.com
ciblyt@gmail.com

Índice

ALIMENTOS

MÉTODO ALTERNATIVO PARA LA IDENTIFICACIÓN DE AMINOÁCIDOS EN AGUAMIEL DE MAGUEY (<i>Agave atrovirens</i> Karw).....	1
MICROENCAPSULACIÓN DE PIGMENTOS NATURALES MEDIANTE SECADO POR ASPERSIÓN UTILIZANDO BIOPOLÍMEROS COMO MATERIALES DE BARRERA	6
EVALUACIÓN BACTERICIDA DE NANOPARTICULAS DE PLATA EN <i>Listeria monocytogenes</i>	12
OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE FIBRA DIETÉTICA OBTENIDA DE LA PASTA RESIDUAL DE <i>Jatropha curcas</i>	16
ELABORACIÓN DE UNA PELÍCULA COMESTIBLE INCLUYENDO PRINCIPIOS ACTIVOS VEGETALES PARA LA PROTECCIÓN DEL CHILE SERRANO	22
OBTENCIÓN DE FIBRA DIETÉTICA DE CÁSCARA Y CORONA DE PIÑA (<i>Ananas comosus</i>) Y DETERMINACIÓN DE SUS PROPIEDADES METABÓLICAS IN VITRO	28
CONSERVACIÓN DE LAS PROPIEDADES ANTIOXIDANTES EN MICROENCAPSULADOS OBTENIDOS DEL PERICARPIO DE <i>Renalmia alpinia</i>	32
ENZIMAS PECTINASA Y FERULOIL ESTERASA PRODUCIDAS POR CEPAS DE <i>Bacillus</i> , AISLADAS DE VAINAS DE <i>Vanilla planifolia</i> SOMETIDAS A UN SISTEMA DE BENEFICIADO TRADICIONAL	37
ANÁLISIS ESTADÍSTICO EN LA EXTRACCIÓN DE BETALAÍNAS A PARTIR DE BUGAMBILIA FUCSIA (<i>Bougainvillea glabra</i>)	43
SUSCEPTIBILIDAD A B-LACTÁMICOS DE <i>Escherichia coli</i> AISLADO DE POLLO CRUDO EN MATAMOROS, TAM	48
ENTEROBACTERIAS AISLADAS EN POLLO CRUDO DE VENTA EN REYNOSA, TAMAULIPAS	51
PATRONES DE MULTIRESISTENCIA EN <i>Escherichia coli</i> AISLADO DE ANIMALES PARA CONSUMO HUMANO	54
RESISTENCIA FENOTÍPICA Y GENOTÍPICA A TETRACICLINAS EN <i>Escherichia coli</i> AISLADO DE CANALES BOVINOS	57
EFFECTO DE LA SONICACIÓN EN LECHE BOVINA ADICIONADA CON <i>Lactococcus lactis subsp. Lactis</i>	60
CARACTERIZACIÓN DE ACEITE DE CACAHUATE (<i>Arachis hypogaea</i>) Y SU MICROENCAPSULACIÓN MEDIANTE SECADO POR ASPERSIÓN	65
ANÁLISIS DE LA CALIDAD DE ACEITE DE AJO ORGÁNICO MEDIANTE EL USO DE UN POTENCIÓSTATO	71
EFFECTO DEL SECADO SOBRE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y CONTENIDO DE PIGMENTOS EN FLOR DE CALABAZA (<i>Cucurbita pepo</i>)	75
EVALUACIÓN POLIFENÓLICA Y ANTIOXIDANTE DE INFUSIONES DE ESPECIAS DE USO COMÚN EN MÉXICO	81
ACTIVIDAD DE DESHIDROGENASA EN RELACIÓN A Ω -1-METILÁCIDOS GRASOS Y CAPSAICINOIDES EN FRUTOS Y CULTIVOS IN VITRO DE <i>Capsicum</i>	86
RELACIÓN ENTRE ACUMULACIÓN DE CAPSAICINOIDES Y CAROTENOIDES EN FRUTOS DE <i>Capsicum</i>	92
EFFECTO EN LAS PROPIEDADES SENSORIALES EN TORTILLAS DE MAÍZ ENRIQUECIDAS CON INGREDIENTES DESHIDRATADOS	98
AMBIENTAL	
ESTUDIO DEL INVENTARIO DE LA HUELLA DE AGUA DE UN POZO DE GAS DE LUTITAS EN EL NORESTE DE MÉXICO	102
EVALUACIÓN DEL ÓXIDO DE ALUMINIO MODIFICADO, PARA LA DEGRADACIÓN DE AZUL DE METILENO	108

Y NARANJA DE METILO EN AGUA, EN PRESENCIA DE RADIACIÓN SOLAR	
BIOFILTRO REDUCTOR DE Cr(VI) PARA EL SANEAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS	114
REMOCIÓN DE COLORANTES TEXTILES MEDIANTE PEROXIDASA DE CHAYOTE (<i>Sechium edule Sw</i>)	120
DETECCIÓN DE CADMIO PARA MONITOREO Y ANALISIS EN SOLUCIÓN ACUOSA UTILIZANDO LA TECNOLOGÍA LTCC	124
REMOCIÓN DEL COLORANTE NEGRO DE ERIOCROMO-T A TRAVÉS DE UN PROCESO DE COAGULACIÓN- FLOCULACIÓN	129
APROVECHAMIENTO DEL MUCÍLAGO DE <i>Opuntia ficus</i> EN LA DECOLORACIÓN DE NEGRO REACTIVO 5 ...	135
DEGRADACIÓN Y DECOLORACIÓN DE NARANJA REACTIVO 16 DE UN EFLUENTE SINTÉTICO UTILIZANDO MUCÍLAGO DE <i>Opuntia ficusindica</i>	140
PROPUESTA DE PLAN DE MANEJO SUSTENTABLE PARA LA REMOCIÓN DEL LIRIO ACUÁTICO EN LA LAGUNA DE EL CASTILLO, XALAPA, VERACRUZ	146
REMOCIÓN DE DICLOFENACO MEDIANTE EL USO DE PLUMA DE POLLO EN MEDIO ACUOSO	151
REMOCIÓN DE 2,4-DICLOROFENOL UTILIZANDO UN ADSORBENTE NATURAL	155
REMOCIÓN DE PLOMO (Pb) MEDIANTE UN CONSORCIO QUERATINOLÍTICO	160
IDENTIFICACIÓN DE MICROORGANISMOS PARA LA DEGRADACIÓN DEL INSECTICIDA IMIDACLOPRID	164
CONSUMO DE NEJAYOTE Y GLICEROL CRUDO POR MICROORGANISMOS BIOELECTROGÉNICOS	170
REMOCIÓN DE HIDROCARBUROS MEDIANTE UN BIOPOLÍMERO: EFECTO DE LA SALINIDAD	177
AISLAMIENTO E IDENTIFICACIÓN DE <i>Vibrio cholerae</i> AISLADA DEL CAUDAL DEL RÍO BRAVO EN LA REGIÓN DE REYNOSA, TAMAULIPAS	183
PROPIEDADES FÍSICAS DE LAS CUCURBITÁCEAS Y SU APLICACIÓN EN LA REMOCIÓN DE CONTAMINANTES	187
MICROORGANISMOS ELECTROGÉNICOS DE AMBIENTES EXTREMOS	191

BIOPROCESOS

GRADO DE DESACETILACIÓN DE QUITOSANO OBTENIDO A PARTIR DEL HONGO SETA (<i>PLEUROTUS OSTREATUS</i>)	197
CARACTERIZACIÓN DE SPIRULINA PLATENSIS PRODUCIDA EN REACTORES BURBUJEADOS DE 200 L	202
PODER CALORÍFICO SUPERIOR DE CHLORELLA Y SPIRULINA ANTES Y DESPUÉS DE LA EXTRACCIÓN DE PIGMENTOS, PROTEÍNAS Y/O LÍPIDOS	207
MEJORAMIENTO DE LA PRODUCCIÓN DE HONGO SETA (<i>Pleurotus ostreatus</i>) EN RESIDUOS AGROINDUSTRIALES PROCEDENTES DE ACATZINGO, PUEBLA MEDIANTE LA ADICIÓN DE POSOS DE CAFÉ	212
PROPUESTA DE OPTIMIZACIÓN DEL REACTOR DE LODOS ACTIVADOS DE LA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES FOVISSSTE V ETAPA EN CHETUMAL QUINTANA ROO	218
ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE FRACCIONES ETANÓLICAS DE BACCHARIS SALICIFOLIA CONTRA STAPHYLOCOCCUS AUREUS	224
MODELADO Y SIMULACIÓN DE UN BIORREACTOR PARA LA PRODUCCION DE XILITOL A PARTIR DE BAGAZO DE CAÑA	229
REMOCIÓN DEL COLORANTE AZUL DIRECTO 201 POR BACTERIAS AISLADAS DE SUELOS CONTAMINADOS	235

MATERIALES

BIOACTIVIDAD Y BIOCMPATIBILIDAD DE SISTEMAS DE HIDROXIAPATITA/ZIRCONIA ESTABILIZADA CON ITRIO	240
OBTENCIÓN DE NANOMATERIALES POLIMÉRICOS NATURALES A BASE DE NANOTUBOS DE CARBONO DE PARED MÚLTIPLE Y QUITOSAN	245

MODIFICACIÓN DE GRAFENO MEDIANTE SONOQUÍMICA GRAPHENE MODIFICATION THROUGH SONOCHEMISTRY	249
MODIFICACIÓN SUPERFICIAL DE NANOTUBOS DE CARBONO DE PARED MÚLTIPLE CON SISTEMAS AMINADOS ASISTIDOS POR ULTRASONIDO	253
MODIFICACIÓN SUPERFICIAL DE ÓXIDOS METÁLICOS Y NTCPM MEDIANTE UN PLASMA DE ESTIRENO	258
REMOCIÓN DE METALES PESADOS	263
ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE ALOTROPOS DE CARBONO MODIFICADOS SUPERFICIALMENTE CON MOLÉCULAS ORGÁNICAS TIPO NAFTOQUINONA MEDIANTE ULTRASONIDO	268
MODIFICACIÓN DE NANOTUBOS DE CARBONO CON ÁCIDO OLEICO MEDIANTE METODOLOGÍAS VERDES	275
EFFECTO DE LA ADICION DE QUERATINA DE POLLO EN LAS PROPIEDADES DE MEZCLAS DE SBR/ATP-EVOH/QUERATINA DE POLLO	280
SÍNTESIS ESTIRENO-MIRCENO POR POLIMERIZACIÓN EN MINIEMULSIÓN	283
PREPARACIÓN, CARACTERIZACIÓN Y FARMACOCINÉTICA DE MICROCAPSULAS DE PNIPAM-INDOMETACINA	286
PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS MEDIANTE DFT DE HETEROESTRUCTURA FORMADA POR MoS2 Y GRAFENO	292
OBTENCIÓN DE NANOESTRUCTURAS METÁLICAS USANDO AGENTES REDUCTORES DE FUENTES NATURALES	297
ESTUDIO DE LA PLASTICIDAD DE CARBÓN MINERAL DE LA REGIÓN CARBONÍFERA	303
SÍNTESIS DE HEMATITA Y MAGNETITA VÍA COPRECIPITACIÓN	306
ACTIVACION MECANOQUÍMICA DE LA MEZCLA PRECURSORA $\text{CaCO}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-2SiO}_2$ PARA FORMAR $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$	309
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LA MEZCLA PRECURSORA $0.75\text{BaCO}_3\text{-0.25SrCO}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-2SiO}_2$ ACTIVADA MECÁNICAMENTE PARA FORMAR $\text{Ba}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8$	313
OBTENCIÓN DE HIDROXIAPATITA POR COPRECIPITACIÓN Y PECHINI. ESTUDIO COMPARATIVO	318
ESTUDIO DFT DE LAS INTERACCIONES ENTRE POLIPIRROL Y ÓXIDO DE ZINC	324
DINÁMICA MOLECULAR DE NO EQUILIBRIO DE NANOCOMPUESTOS DE POLÍMERO REFORZADOS CON NANOPARTÍCULAS MODIFICADAS SUPERFICIALMENTE: ANÁLISIS DE FLUJO BANDEADO	330
POLIMERIZACIÓN EN EMULSIÓN DE METACRILATO DE METILO EN PRESENCIA DE ÓXIDO DE ZINC	335
ANÁLISIS DE LA DESCOMPOSICION DE EVA-OH POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJA A TIEMPO REAL	341

PROCESOS

IMPACTO DE DOS TECNOLOGÍAS DE PROCESAMIENTO EN LOS PARÁMETROS DE CALIDAD DE LA MIEL DE AGAVE (<i>Agave atrovirens Karw</i>)	346
MODELACIÓN DEL PROCESO DE SINTERIZACIÓN DE UN ESMALTE CERÁMICO POR ELEMENTOS FINITOS .	351
COMPARACIÓN DEL EFECTO DE NUEVAS FILOSOFÍAS DE CONTROL SOBRE EL CONSUMO DE GAS COMBUSTIBLE EN EL PROCESAMIENTO DE CONDENSADO USANDO SIMULADOR DE PROCESOS HYSYS ...	357
CONTROL EN CASCADA BASADO EN MÚLTIPLES MEDICIONES DE TEMPERATURA PARA COLUMNAS DE DESTILACIÓN	362
ESTUDIO DE LAS CONDICIONES DE LIMPIEZA DE ARENA SÍLICE PARA USO INDUSTRIAL	368
SIMULACIÓN Y CONTROL DE LA DESHIDRATACIÓN DE ETANOL MEDIANTE DESTILACIÓN EXTRACTIVA UTILIZANDO UNISIM	373
SIMULACIÓN DINÁMICA DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTAS EMPLEANDO COLOCACIÓN	379

ORTOGONAL	
PREDICCIÓN DE LA TEMPERATURA DE BOYLE EN MEZCLAS BINARIAS, USANDO UNA ECUACIÓN DE ESTADO DE QUINTO GRADO	385
SUSTENTABILIDAD ENERGÉTICA	
ANCE ENERGÉTICO DEL ESTADO DE PUEBLA PARA EL PERÍODO 2010-2015	389
FUENTES DE ENERGIA RENOVABLE A PARTIR DE BIOMASA	395
ENERGÍA EÓLICA Y EL USO DE LOS AEROGENERADORES	400

BIOFILTRO REDUCTOR DE Cr(VI) PARA EL SANEAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS

BIOFILTER REDUCER TO Cr(VI) FOR THE SANITATION OF CONTAMINATED WATER

Vashti L. Perez-Alvarez¹, Alejandra Tovar-Corona*¹, J. Jaime Vázquez-Bravo¹, M. del Rayo Guevara-Villa¹
^a Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla, Ingeniería en Biotecnología 1, Puebla, Puebla, México
aletovco@yahoo.com

Recibido el 22 de abril del 2017. Aceptado el 28 de julio del 2017.

Resumen

En los últimos años, las investigaciones se han centrado en desarrollar procesos para eliminar el cromo presente en aguas residuales, tales como: intercambio iónico sobre resinas poliméricas, coagulación-floculación, adsorción sobre carbón activado y reducción; precipitación química y sedimentación [1]. En este sentido, la síntesis química de ligantes y el uso de reductores, pretende ser un aliado en el procesamiento y mejora en la calidad de aguas contaminadas con cromo hexavalente, disminuyendo considerablemente el impacto que tiene en la salud y en el ambiente [2, 3].

En el presente trabajo se describe la aplicación de un sistema bioreductor para la disminución de cromo hexavalente en aguas residuales, a través de un biofiltro compuesto por bagazo de *Agave potatorum* utilizado como soporte, extractos orgánicos polares ricos en ácido ascórbico, ácido cítrico y flavonoides, metabolitos con una alta capacidad antioxidante y el ligante *N*-donador Tris-(2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina, obtenido por química verde y caracterizado por técnicas espectroscópicas de rutina: EM por impacto electrónico, IR y UV-Vis. El último componente presenta una importante actividad quelante sobre el ion Cr (VI) el cual es reducido y adsorbido por el sistema de origen biotecnológico eliminándolo del agua con una eficiencia del 96%, evaluando los resultados por espectrofotometría UV-Vis.

Palabras clave: Biofiltro, Bioreductor, Cromo hexavalente

Abstract

In recent years, investigations have focused on developing processes to eliminate the chromium present in sewage, such as: Ion Exchange, using polymeric resins, coagulation-flocculation, adsorption on activated carbon and reduction; chemical precipitation and sedimentation [1]. In this sense, the chemical synthesis of binders and the use of reducers, pretends to be an ally in the processing and improvement in the quality of waters contaminated with hexavalent chromium, considerably reducing the impact that has on the health and environment [2, 3]. This paper describes the application of a system bioreductor for the decrease of hexavalent chromium in wastewater, through a biofilter composed of *Agave bagasse potatorum* used as support, polar organic extracts rich in Ascorbic acid, acid citric and flavonoids, metabolites with a high antioxidant capacity and Binder *N*-donator Tris-(2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden) amino) ethyl) imine obtained by green and characterized by spectroscopic techniques of routine Chemistry: EM by electron impact, IR and UV-Vis. The last component is an important activity chelator on ion Cr (VI) which is reduced and adsorbed by the biotechnology system by deleting it from the water with a 96% efficiency, evaluating the results by UV-Vis spectrophotometry.

Keywords: Biofilter, Bioreductor, hexavalent chromium

1. Introducción.

La presencia de metales pesados en el medio ambiente es una fuente de contaminación y daño potencial para cualquier ser vivo, ya que debido a su alta estabilidad no pueden biodegradarse, por lo que sólo cambian de estado de oxidación y se combinan con otras sustancias, dando lugar a formas más tóxicas del metal por lo que los seres vivos son incapaces de bio-transformarlos (no se metabolizan) [6,7].

El cromo hexavalente, Cr (VI), es el contaminante principal en las aguas residuales provenientes de industrias metalúrgicas, galvanoplásticas y del cuero. Es carcinógeno y mutagénico, así como un agente altamente oxidante. Se difunde fácilmente en los suelos, ambientes acuáticos y a través de la piel [8-10].

La cuantificación del contenido de metales pesados se puede determinar en muestras de aire, suelo, agua, sedimentos y tejidos de organismos vivos a partir de técnicas espectrofotométricas. Los valores de Cr en agua

permitidos en México son de 0.05 mg /L [5] por lo cual la concentración de dicho metal en la mayoría de cuerpos de agua supera el límite establecido [11].

Es debido a estas alarmantes cifras que en los últimos años las investigaciones se han centrado en desarrollar procesos para eliminar el cromo presente en aguas residuales industriales, entre los que podemos mencionar: intercambio iónico sobre resinas poliméricas, coagulación-floculación, adsorción sobre carbón activado y reducción; precipitación química y sedimentación [12-14]. En este sentido, la síntesis química de ligantes y el uso de reductores, pretende ser un aliado en el procesamiento y mejora en la calidad de aguas contaminadas con Cr (VI), disminuyendo considerablemente el impacto que tiene en la salud y medio ambiente [15-19].

En condiciones naturales el cromo se presenta casi siempre en forma trivalente y prácticamente todo el cromo hexavalente que existe es generado por las actividades humanas.

Las especies de Cr (VI) en solución acuosa son $[\text{Cr}_2\text{O}_7]^{2-}$, $[\text{CrO}_4]^{2-}$, $[\text{HCrO}_4]^-$ y su distribución depende del pH de la solución y de la concentración del metal [20]. Aunado a la actividad antropogénica normal, la extensa aplicación de este metal en la industria y manufactura ha permitido que sus niveles se eleven considerablemente [21,24]. Por otro lado, como resultado del proceso de reducción la especie de Cr (VI), se transforma a Cr^{3+} . Este catión, a un pH en condiciones ambientales precipita como hidróxido, $\text{Cr}(\text{OH})_3$. Este hidróxido suele formarse en estado coloidal, con lo que permanece en suspensión o bien se adhiere a otras partículas sólidas mayores, precipitando e incorporándose en el sedimento. No obstante, si el pH es menor a 5, el ion Cr^{3+} no precipita, manteniéndose en disolución. De las dos especies que se encuentran en la naturaleza, la trivalente es relativamente benigna, mientras que la hexavalente es tóxica [25,26]. El Cr (VI) es de naturaleza aniónica y no es fuertemente adsorbido por el sedimento o la materia particulada, por ello es más móvil que el Cr (III) y no es propenso a sedimentar. Tiene tendencia a reaccionar fuertemente con sustancias oxidantes, moléculas orgánicas normalmente y formar Cr (III). El cual tiene una fuerte tendencia a formar complejos estables con especies orgánicas o inorgánicas cargadas negativamente [27,28].

En este trabajo presentamos un biofiltro que se basa en el uso de la capacidad reductora de los extractos naturales obtenidos de la cascara de naranja dulce (*Citrus sinensis*) y la actividad quelante de un ligante orgánico, a partir del cual podemos disminuir las concentraciones de cromo tóxico (Cr hexavalente) en aguas residuales contaminadas.

2. Materiales y métodos.

Los espectros de IR fueron registrados en un aparato Nicolet FT-IR Magna 700 en pastillas de KBr y de

polietileno. Los espectros de masas mediante la técnica de impacto electrónico IE fueron registrados con un espectrómetro JEOL JMS-SX 102A operado en el modo ion positivo a 70 eV, los espectros de masas FAB⁺ se registraron con un espectrómetro JEOL JMS AX505HA; los datos están expresados en unidades masa /carga (*m/z*). Los puntos de fusión fueron medidos utilizando un aparato Melt-Temp II y no están corregidos. Las reacciones fueron monitoreadas por cromatografía en placa fina, empleando cromatoplasmas analíticas de óxido de aluminio TLC60F₂₅₄ neutras de 0.54 mm de espesor. La extracción de la fase orgánica a partir del crudo de reacción se realizó mediante extracciones con acetato de etilo y agua tridestilada. La separación de las mezclas de reacción se efectuó mediante placa preparativa DC-Fertigplatten SIL G-100 UV₂₅₄, 1,0mm. La placa preparativa se fue eluyendo con una proporción 7:3 de Hexano/Acetato de etilo, los cuales fueron previamente destilados.

2.1. Síntesis de base de Schiff L1 y preparación de solución ligante.

Se sintetizó el ligante polidentado *N*-donador mediante condensación agregando cinamaldehído con la amina primaria en una proporción estequiométrica 3:1 equivalentes en un matraz de bola, dejando en agitación durante 24 horas, posteriormente se hicieron lavados con agua destilada y extracciones con acetato de etilo [29-31]. La solución amarilla resultante fue secada sobre Na_2SO_4 anhidro. Por último, se dejó cristalizando en una mezcla AcOEt/Hexano 1:1, obteniendo cristales amarillos con un rendimiento de 96%. A partir del compuesto obtenido, se preparó una solución $3 \cdot 10^{-3}$ M, utilizando 0.4g de ligante L1 Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden) amino) etil) imina y aforando a 250 ml con acetona como disolvente.

2.2. Desarrollo de biofiltro a partir de *Agave potatorum* y *Citrus sinensis*

La naranja dulce (*Citrus sinensis*) fue obtenida de manera comercial, seleccionando las frutas que presentaran color característico, que no presentaran manchas o abolladuras en la cascara.

Se pesaron 150 gr de cascara de naranja, se colocaron en el cartucho de extracción del equipo Soxhlet y se adicionaron 300 mL de etanol absoluto. Se colocó a reflujo con un tiempo de reacción de 3 horas con agitación. Una vez obtenido el extracto se concentró hasta obtener un volumen final de 50 mL utilizando vacío a presión reducida.

Las muestras de *Agave potatorum* fueron hojas basales obtenidas de plantas cultivadas de 8 años de edad.

Obtenidas las hojas (100gr), se procedió a lavarlas cuidadosamente con agua tridestilada hasta obtener hojas libres de polvo, posteriormente se trituró hasta alcanzar una fase solido líquido para ser posteriormente separada

por filtración, la fase sólida (fibra) se deshidrató por convección natural para su posterior uso en la extracción. Posterior a esto se procedió a un secado en estufas a 80°C por 24hrs y la fibra seca se combinó con 50mL de la solución quelante-bioreductora, generando una masilla que fue empaquetada en una columna de vidrio.

Los 50mL de solución quelante-bioreductora fue obtenida utilizando distintas cantidades del extracto orgánico (0-25mL), 25mL del ligante L1 y completando la solución con agua tridestilada (0-25mL) hasta alcanzar un volumen constante de 50mL. Cada prueba se realizó por triplicado para garantizar la repetitividad de los resultados.

2.3. Técnica colorimétrica para cuantificación de cromo hexavalente [32].

250 mg de difenilcarbazida se disolvieron en 50 mL de acetona. 141,4 mg de dicromato de potasio seco, se disuelve con agua y se afora a 100mL. Un mililitro de esta disolución es equivalente a 500,0 µg de Cr (VI). Se adicionó una alícuota de 1 mL de la disolución madre de cromo (VI) a un matraz volumétrico de 100 mL y se aforó con agua destilada. 1 mL de esta disolución equivale a 5,0 µg de Cr (VI).

La muestra problema fue ajustada a pH<2 con ácido sulfúrico 0.2 N, se tomó una alícuota de 100 ml y se agregan 2 ml de la disolución de difenilcarbazida, se mezcla y se deja reposar por 10 min para desarrollar el color completamente.

2.3.1. Curva de calibración.

Se midieron volúmenes de disolución estándar de Cr (VI) 5,0 µg/mL entre 2,0 mL y 20,0 mL. de esta disolución para obtener estándares en el intervalo de 10 ppm a 100 ppm de Cr (VI). Se agregó ácido sulfúrico 0,2 N hasta llegar pH<2 y se siguió el procedimiento para el desarrollo de color, posteriormente se midió su absorbancia en el espectro UV-VIS a 540nm.

2.4. Evaluación quelante y bioreductora.

Con la finalidad de evaluar la capacidad quelante y bioreductora de nuestros distintos componentes, llevamos a cabo tres experimentos (cada uno por triplicado), en el primero de ellos (Experimento A) se buscó conocer la proporción metal-ligante ideal para poder obtener la mayor cantidad de complejos, suponiendo una unión 1:1 entre cada molécula orgánica y cada uno de los iones metálicos Cr⁶⁺. Sin embargo, al tratarse de un ligante polidentado, se puede pensar en que dicha proporción cambie.

Posteriormente debido a los altos volúmenes (100mL) de solución problema y hasta 70mL de solución orgánica utilizados en los primeros experimentos, se decidió

realizar pruebas alineadas a las técnicas verdes (experimento B) con un modelo a escala, manejando volúmenes máximos de 5mL. Por último, se integró el ligante orgánico, al sistema bioreductor y el bagazo de *Agave potatorum* para evaluar la eficacia del sistema biotecnológico desarrollado para la adsorción-reducción del metal tóxico (experimento C).

2.4.1. Experimento A.

A las soluciones estándar de Cr(VI) se les agregó el ligante L1 en las proporciones descritas en la tabla 1. Estas soluciones se hicieron reaccionar de acuerdo a la técnica antes mencionada para el desarrollo de color y se leyeron a los 10 minutos en una celda de cuarzo a 540 nm.

Cr (VI) [100ppm]	SOLUCIÓN L1	Difenilcarbazi da
100 ml	0 ml	2ml
66,6ml	33,3ml	2ml
50,0ml	50.0ml	2ml
33.3mL	66.6mL	2ml

Tabla1: Componentes de aguas modelo experimento A

2.4.2. Experimento B.

Se prepararon soluciones modelo a escala con 3 ml como volumen final, se tomaron alícuotas de la disolución estándar de Cr (VI) y de la solución de ligante con las proporciones señaladas en la tabla 2. A cada una de las muestras se les hicieron reaccionar de acuerdo a la técnica para el desarrollo de color y se leyeron a 540 nm de acuerdo a la normatividad oficial para determinación de cromo hexavalente en aguas residuales.

Cr (VI) [100ppm]	LIGANTE L1	DIFENILCABAZIDA
3,0mL	0 mL	60µL
2.0mL	1.0mL	
1.5.mL	1.5.0mL	
1.0mL	2.0mL	

Tabla2: Componentes de aguas modelo experimento B

2.4.3. Experimento C

La mezcla preparada según la descripción del apartado 2.2 y según las proporciones señaladas en la tabla 3, se dejó secar a temperatura ambiente y fue colocada en columnas cromatográficas de vidrio.

Sobre la misma se hicieron pasar 50mL de una solución estándar de Cromo (VI) con una concentración de 100ppm, la cual fue recuperada y tratada de acuerdo a la norma correspondiente para conocer su concentración por espectrofotometría UV-Vis.

No.	Solución Ligante L1	Extracto orgánico (mL.)	H2O (mL.)
1	25 mL.	0	25
2		5	20
3		10	15
4		15	10
5		20	5
6		25	0

Tabla 3: Proporciones de mezcla quelante-bioreductora

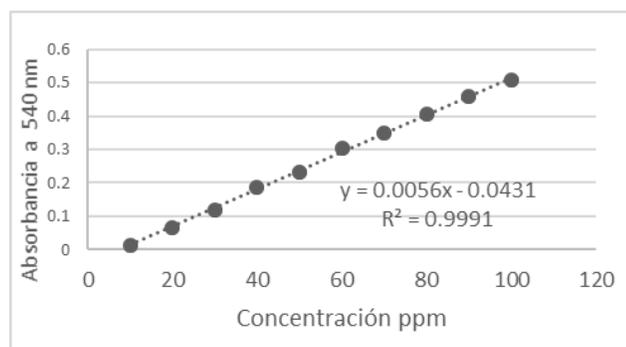
3. Resultados y discusión.

3.1. Obtención del ligante L1.

El ligante L1 se obtuvo con un rendimiento del 96% como un sólido cristalino amarillo con p.f.=85°C en su espectroscopia FT-IR se encuentran bandas de absorción con frecuencias de 1666.49 cm^{-1} (ν) C=N; 1624.752 cm^{-1} (ν) (C=C), 1115.654 cm^{-1} (ν) (C-N); 680.10 cm^{-1} (ν) (C-H) fuera de plano. En el espectro de masas por impacto electrónico se observa el ion molecular del compuesto $m/z = M^+ + H_2O = 501$ y confirmando la fórmula molecular propuesta $C_{33}H_{36}N_4$. Estos parámetros permiten determinar cuantitativamente los componentes del ligante sintetizado *N*-donador.

3.2. Curva de calibración

Se realizaron diluciones con diferentes concentraciones de cromo hexavalente que fueron desde aquella que tenía 10ppm hasta la que su concentración era de 100ppm de dicho metal, posteriormente se sometió a la técnica de desarrollo de color para realizar las lecturas de absorbancia en el espectrofotómetro UV-VIS, después de hacer las lecturas de absorbancia a 540nm observadas en la tabla 4, este gráfico nos ayudó como referencia para determinar la cantidad de Cr (VI) presente las siguientes muestras estudiadas [32].



Gráfica 1 Curva de calibración A540nm

3.3. Experimento A.

En la figura 1 verificamos que el ligante sintetizado tiene la capacidad de reducir en diferentes proporciones la cantidad de Cr(VI) gracias al efecto quelante que presenta, formando un complejo metal-ligante, el cual

macroscópicamente se puede observar en forma de precipitado. Las muestras que contenían una mayor cantidad de ligante respecto al Cr, no mostraron lectura a 540nm, puesto que prevalecía la cantidad de ligante y el cromo hexavalente es atrapado en su totalidad; mientras que aquellas en las que había una cantidad menor de ligante contra la cantidad de Cr (VI) (muestras 2:1 y 3:1), mostraron una reducción considerable, siendo menor la que contiene 2:1 equivalentes de Cr (VI) L1. La efectividad de la actividad quelante se evaluó con base en la curva de calibración correspondiente de acuerdo a la norma NMX-044, observando una disminución del ion hexavalente hasta en un 87%, esto nos permite verificar no sólo la eliminación del ion libre en aguas modelo sino la proporcionalidad quelante superior a la proporción 1:1 comprobando que nuestro ligante tiene un mayor efecto quelante que el esperado.

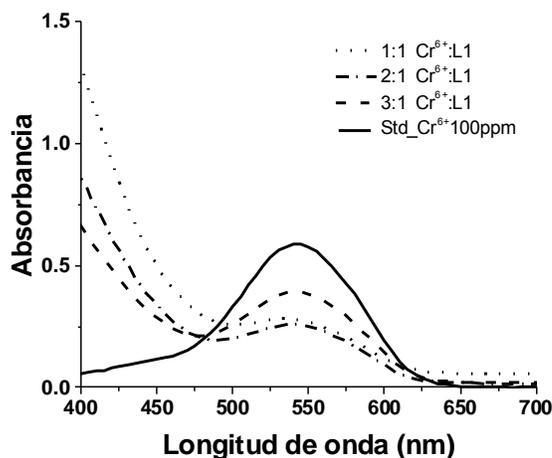


Figura 1: Espectro UV-VIS experimento A.

3.4. Experimento B.

Se trabajaron disoluciones a escala con un volumen final de 5mL apegándonos al fundamento del experimento A. Repitiendo la metodología y a partir de una dilución estándar de 100ppm se mezclan distintas proporciones de acuerdo a lo descrito en la tabla 2. En la figura 2 se puede observar que todas las mezclas Cr-Ligante tienen una absorbancia menor al estándar, siendo la menor la que tiene una proporción 4:1, lo que señala que la capacidad quelante depende de los volúmenes del ion Cr^{6+} manejados en la solución y no sólo de la concentración. Por lo tanto se reitera que la capacidad quelante de metales pesados del ligante Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina L1, es realmente efectiva ya que se reduce hasta en un 87%, gracias a la formación de quelatos que precipitan y a los cuales posteriormente se les puede hacer un diferente tratamiento de purificación para el control de contaminación por dicho metal.

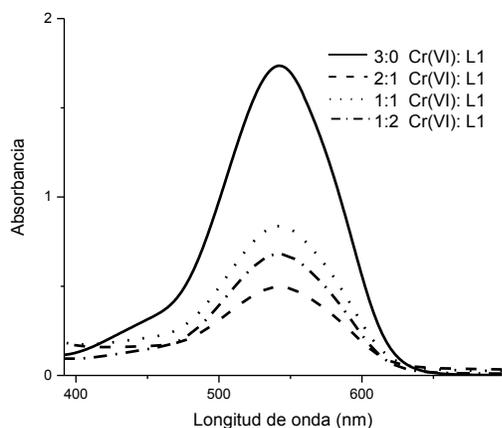


Figura 2. Espectro UV-vis experimento B

3.4. Experimento C

La solución pasada por el biofiltro muestra una disminución en la absorbancia característica a los 540nm lo que corrobora la eliminación cuantitativa del ion Cr^{6+} , el sistema estudiado mostró propiedades de adsorción comparables a las de la alúmina comercial (97%) de eliminación de Cr(VI) [33,34]. En todas las repeticiones, la columna que mostró la menor absorbancia es la que contiene la mezcla 4: 25ml de ligante L1/ 15 mL de extracto bioreductor/ 10mL de H_2O soportados sobre el adsorbente de *Agave potatorum* (Figura 3), obteniendo una efectividad de reducción- adsorción hasta del 96%, lo que nos permite estandarizar las proporciones en nuestro biofiltro.

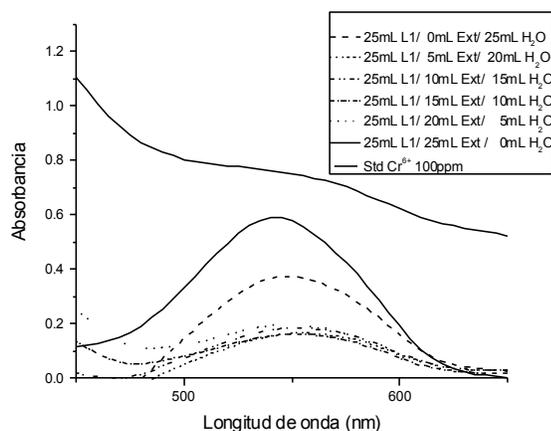


Figura 3. Espectro UV-vis experimento C

4. CONCLUSIONES

El presente estudio permitió establecer el enorme potencial de un producto biotecnológico en la adsorción/eliminación de Cr(VI) en medio acuoso, en concentraciones de metal equivalentes a las halladas en

aguas residuales provenientes de industrias en México. Este biofiltro se desarrolló a partir de la bagazo de *Agave potatorum* como adsorbente, extracto etanólico de *Citrus sinensis* y el ligante orgánico Tris (2-(((1E, 2E)-3-fenilaliliden)amino)etil)imina el cual fue sintetizado mediante procesos sustentables y se caracterizó con métodos espectrofotométricos infrarrojo, ultravioleta-visible y espectrometría de masas. Al evaluar la actividad quelante de dicho ligante frente a Cr (VI) en aguas modelo de concentración conocida mediante el seguimiento por espectrofotometría ultravioleta-visible, de acuerdo a la NORMA OFICIAL MEXICANA NMX-AA-044-SCFI-2001 se obtuvo una efectividad de hasta el 96% en la remoción de Cr (VI). Además, se integró con un adsorbente orgánico realizado a partir de bagazo de *Agave potatorum* y el extracto etanólico obtenido a partir de *Citrus sinensis*, dicho sistema además de la propiedad quelante tiene adicionado un sistema bioreductor natural convirtiendo al ion tóxico Cr(VI) en iones biocompatibles, asegurando no solo el saneamiento acuoso sino la disminución en la toxicidad de los sedimentos.

Agradecimientos

Este proyecto fue desarrollado gracias al financiamiento PRODEP DSA/103.5/15/10800.

Referencias

- Oze, C., Bird, D. K., & Fendorf, S. *Proceedings of the National Academy of Sciences* (2013), 6544-6549.
- Martínez, R. M. Q., Chacón, G. S., Arias, H. R., Prieto, J. R. E., Licón, C. H., & Acosta, J. C. Evaluación de parámetros físico químicos y contenido de metales en sedimentos de la Laguna de Bustillos en Chihuahua, México. Investigación no publicada (2011).
- Anastas, P. A. *Green Chemistry: Theory and Practice. J. C. Green Chemistry: Theory and Practice, New York, Oxford University, (2000), 30-36.*
- Newman Stephen G., Jensen Klays F. *Green Chem.* (2013), 1456-1472
- Clark James, Sheldon Roger, Raston Colin, Poliakoff Martyn, Leitner Walter, *Green Chem.* (2014), 18-23
- Gutiérrez, R. L., Rubio-Arias, H., Quintana, R., Ortega, J. A., & Gutierrez, M. *International journal of environmental research and public health.* (2008), 91-98.
- Reyes-Gutiérrez, L. R., Romero-Guzmán, E. T., Olmos-Salinas, M. G., & Rodríguez-Castillo, R. *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas* (2009), 104-116.
- Fiedler, S., Siebe, C., Herre, A., Roth, B., Cram, S., & Stahr, K., *Water, air, and soil pollution* (2009), 35-47.
- Rubio-Arias, H., Quintana, C., Jimenez-Castro, J., Quintana, R., & Gutierrez, M. *International journal of environmental research and public health* (2010), 2071-2084.

10. Rubio-Arias, H., Rey, N. I., Quintana, R. M., Nevarez, G., & Palacios, O. *International journal of environmental research and public health* (2011), 2386-2400.
11. Villalobos-Aragón, A., Ellis, A. S., Armienta, M. A., Morton-Bermea, O., & Johnson, T. M. *Applied Geochemistry* (2012), 1783-1794.
12. Steffy, D. A., Nichols, A. C., Morgan, L. J., & Gibbs, R. *Water, Air, & Soil Pollution* (2013), 1-11.
13. Wise Jr, J. P., Wise, J. T., Wise, C. F., Wise, S. S., Gianios Jr, C., Xie, H., & Wise Sr, J. P. *Environmental science & technology* (2015), 2997-3006.
14. Cai, Y., Rooker, J. R., Gill, G. A., & Turner, J. P. *Journal of Fisheries and Aquatic Sciences* (2007), 458-469.
15. Guentzel, J. L., Portilla, E., Keith, K. M., & Keith, E. O. *Science of the Total Environment* (2007), 316-324.
16. Trefry, J. H., Trocine, R. P., McElvaine, M. L., Rember, R. D., & Hawkins, L. T. *Environmental geology* (2007), 375-385.
17. García-Hernández, J., Cadena-Cárdenas, L., Betancourt-Lozano, M., García-De-La-Parra, L. M., García-Rico, L., & Márquez-Farías, F. *Toxicological & Environmental Chemistry* (2007), 507-522.
18. Lewis, M., & Chancy, C. *Chemosphere* (2008), 2016-2024.
19. Gutiérrez-Galindo, E. A., Casas-Beltrán, D. A., Muñoz-Barbosa, A., Daesslé, L. W., Segovia-Zavala, J. A., Macías-Zamora, J. V., & Orozco-Borbón, M. V. *Bulletin of environmental contamination and toxicology*, (2008), 123-127.
20. DeLaune, R. D., Devai, I., Hou, A., & Jugsujinda, A. *Soil & Sediment Contamination* (2008), 98-106.
21. Osuna-Martínez, C. C., Páez-Osuna, F., & Alonso-Rodríguez, R. *Bulletin of environmental contamination and toxicology* (2012), 339-343.
22. Shah, A. Q., Kazi, T. G., Baig, J. A., Afridi, H. I., Kandhro, G. A., Khan, S., & Wadhwa, S. K. *Food and Chemical Toxicology* (2010), 1550-1554.
23. Leal-Acosta, M. L., Shumilin, E., Mirlean, N., Sapozhnikov, D., & Gordeev, V. *Bulletin of environmental contamination and toxicology* (2010), 609-613.
24. Macías Medrano, R., Hinojosa Reyes, L., Hernández-Ramírez, A., & Acuna-Askar, K. *Journal of the Chilean Chemical Society* (2010), 486-490.
25. Trasande, L., Cortes, J. E., Landrigan, P. J., Abercrombie, M. I., Bopp, R. F., & Cifuentes, E. *Environmental Health* (2010), 9-11.
26. Páez-Osuna, F., Calderón-Campuzano, M. F., Soto-Jiménez, M. F., & Ruelas-Inzunza, J. *Marine pollution bulletin*, (2011), 1320-1323.
27. Evan P. Beaumier, Brennan S. Billow, Amrendra K. Singh, Shannon M. Biros and Aaron L. Odom *Chem. Sci.* (2016), 2532-2536.
28. Jie Liu, Yuan-Ye Bao, Ye Liu, Wei-Min Ren, Xiao-Bing Lu, *Polym. Chem.* (2013), 1439-1444
29. Guo, B. L.-J.-G.-P.-Y. *Inorganica Chimica Acta* (2012), 4987-4994.
30. Bao-Lin Liu, Yan-Xia Wang, Fan-Hong Kong, Ruo-Jie Tao, *Inorganica Chimica Acta*, (2012), 469-472.
31. Kusai Alomar, Vincent Gaumet, Magali Allain, Pascal Richomme, Gilles Bouet, *Inorganica Chimica Acta*, (2012), 433-439.
32. CONAGUA, *Norma Mexicana NMX-AA-044-SCFI-2014 Análisis de agua, medición de cromo hexavalente en aguas naturales, salinas residuales y residuales tratadas-Método de Prueba*, (2014), 1-28.
33. Vargas-Nieto C., Carriazo J.G., Castillo E., *Ing. Investig.* (2011), 154-162.
34. Glorias-García F., Arriaga-Merced J.M., Roa-Morales G., Varela-Guerrero V., Barrera-Díaz C.E., Bilveu B., *Journal on Industrial and Engineering Chemistry*. (2014), 2477-2483.



Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla.

Ingeniería en Biotecnología.

**Extracción, identificación y caracterización de metabolitos
extraídos de plantas de la región.**

Reporte de estancias.

Laboratorio de Nanobiotecnología

María Guadalupe Sosa Martínez.

4° Cuatrimestre.

Asesor industrial:

Dra. Alejandra Tovar Corona.

Asesor académico:

Dr. Rafael Torres Montiel.

Puebla, Pue.

06 de septiembre al 03 Octubre 2016.

DICTAMEN DE APROBACIÓN.

Asesor industrial

Dra. Alejandra Tovar Corona.

Asesor académico

Dr. Rafael Torres Montiel.

Alumna

María Guadalupe Sosa Martínez.

Índice.

Introducción:	5
Objetivo General.	6
Objetivos específicos.	6
Marco teórico.	7
Nanotecnología.	7
Definición y clasificación de los nanomateriales.	7
Basados en carbono	8
Basados en metales	8
Dendrimeros.....	8
Compuestos.....	8
Agave potatorum.	8
Cromatografía.	9
Cromatografía en papel.	10
Cromatografía en capa fina	12
.....	14
Disolventes utilizados para la cromatografía.	14
Acetato de etilo	14
Hexano.....	15
Espectrofotometría UV-Vis	16
.....	17
Transmitancia y Absorbancia	18
Metodología	20
Materiales Cromatografía de columna.	20
Procedimiento	20
Materiales Cromatografía de capa fina	24
Procedimiento	24
Revelado de placas.	25
Material concentración de fases.	25
Materiales lectura espectrofotómetro UV/Vis	26
Procedimiento.	26
Resultados	28
Discusión de resultados	31

Conclusiones.....	32
Bibliografía.....	33
Imagen 1.1 _____	7
Imagen 1.2 _____	9
Imagen 1.3 _____	10
Imagen 1.4 _____	11
Imagen 1.5 _____	13
Imagen 1.6 _____	14
Imagen 1.7 _____	17
Imagen 1.8 _____	17
Imagen 1.9 _____	19
Imagen 2.1 _____	21
Imagen 2.2 _____	22
Imagen 2.3 _____	23
Imagen 2.4 _____	23
Imagen 2.5 _____	25
Imagen 2.6 _____	26
Imagen 2.7 _____	27
Imagen 3.1 _____	28
Imagen 3.2 _____	29
Imagen 3.3 _____	30
Imagen 3.4 _____	30

Introducción:

Existen indicios sobre los posibles efectos de las nanopartículas en la salud, el medio ambiente y el poderío militar, así como sus consecuencias en los países menos desarrollados o aquellos que aún no se incorporan a la carrera de lo diminuto. Sin embargo, la mayor parte de los documentos sobre nanotecnología destaca que las consecuencias serán menores frente a las enormes ventajas para la sociedad ¹.

La búsqueda de nuevos métodos de síntesis de nanopartículas metálicas es una necesidad creciente debido a que se espera mejorar la eficiencia de los ya existentes, así como la minimización de sus efectos en el medio ambiente.

En este sentido, la búsqueda de tecnologías amigables con el medio ambiente ha permitido el desarrollo de investigaciones dirigidas hacia lo que se define como “Síntesis verde”. En este caso de la síntesis de nanopartículas metálicas, se ha centrado en el uso de diferentes organismos (bacterias, hongos y algas) así como extractos de plantas o frutos que participan como agentes biológicos en las reacciones de reducción de diferentes sales metálicas, estableciendo de esta forma una estrategia de síntesis verde o ruta verde.

Elementos como pétalos de flores, hojas, frutos, fibras y extractos de plantas han sido exitosamente utilizados.

Miles de especies de plantas han sido seleccionadas por su actividad antimicrobiana, pero relativamente pocas resultaron ser suficientemente activas y no tóxicas para los humanos. La proyección de extractos de plantas y productos vegetales para la actividad antimicrobiana ha demostrado que las plantas superiores representan una fuente potencial de nuevos agentes antimicrobianos.

Con base en lo anterior el objetivo de este proyecto fue identificar y caracterizar metabolitos de plantas de la región para poder utilizarlos posteriormente en la síntesis de nanomateriales.

Objetivo General.

Extracción, identificación y caracterización de metabolitos extraídos del agave potatorum utilizando técnicas cromatográficas y espectrofotometría UV-Vis

Objetivos específicos.

- Purificar los metabolitos presentes en el extracto acuoso de Agave sp., a través de procesos cromatográficos (cromatografía en columna).
- Identificar la pureza de las muestras a través de cromatografía en capa fina (TLC)
- Clasificar las fases obtenidas, con base en su polaridad y bandas de absorción (longitudes de onda máximas) en espectrofotometría UV-Vis

electrones que se mueven en su seno o de como estén ordenados los átomos en la materia. Por lo consiguiente, si reduce las dimensiones de un material, se modifican sus propiedades y en consecuencia se pueden diseñar materiales con nuevas propiedades.

Actualmente la Agencia del Medio Ambiente (EPA) de EUA ha clasificado los nanomateriales actuales en cuatro tipos, a saber:

Basados en carbono

Estos nanomateriales están compuestos mayoritariamente por carbono y suelen adoptar formas como esferas huecas, elipsoides o tubos. Los nanomateriales de carbono con forma elipsoidal o esférica se conocen como fullerenos, mientras que los cilíndricos reciben el nombre de nanotubos¹.

Basados en metales

Estos nanomateriales incluyen diferentes composiciones, usualmente son las más demandadas las nanopartículas de oro, plata, cobre y algunos óxidos metálicos como el dióxido de titanio

Dendrímeros

Estos materiales son polímeros de tamaño nanométrico contruidos a partir de unidades ramificadas. La superficie de un dendrímero tiene numerosos extremos de cadena, que se pueden adaptar para desempeñar funciones químicas específicas.

Compuestos

Los compuestos combinan las nanopartículas con otras nanopartículas o con materiales de mayor tamaño¹.

Agave potatorum.

Son plantas monocotiledóneas, polimórficas, la altura media de la planta adulta es 0.54m (del nivel del suelo al cono central de hojas), tiene más de 60 hojas avadas dispuestas en una roseta pequeña compacta (diámetro aproximado de

Marco teórico.

Nanotecnología.

La nanotecnología se refiere a la creación, síntesis, diseño, manipulación y explotación de materiales a través del control de la materia, a nivel manométrico, a este nivel las propiedades de los materiales cambian significativamente al llegar a esta escala con respecto a los materiales en bulto, entendiendo como propiedades de un material, la magnitud que responde al aplicar un cierto estímulo ^{1,2}.

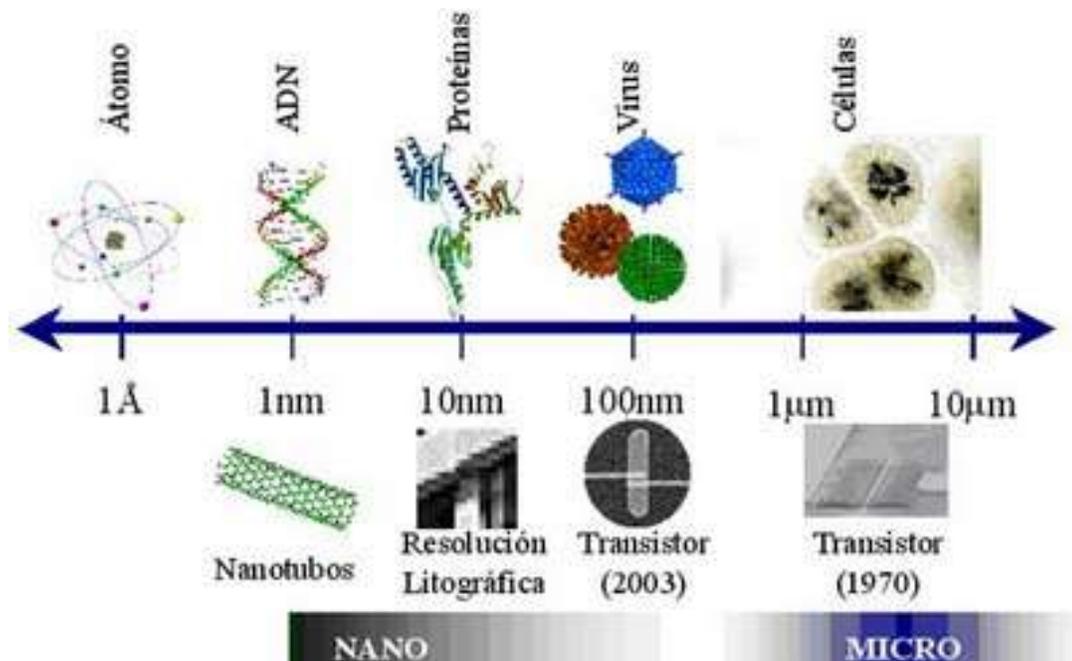


Imagen 1.1 de nano a micro.

Recuperada de <http://www.nanotecnologia.cl/que-es-nanotecnologia/2>

Definición y clasificación de los nanomateriales.

Los nanomateriales son materiales con propiedades morfológicas más pequeñas que un micrómetro en al menos una dimensión. Donde muchas de las propiedades de estos sistemas dependen de cómo se comporten los

electrones que se mueven en su seno o de como estén ordenados los átomos en la materia. Por lo consiguiente, si reduce las dimensiones de un material, se modifican sus propiedades y en consecuencia se pueden diseñar materiales con nuevas propiedades.

Actualmente la Agencia del Medio Ambiente (EPA) de EUA ha clasificado los nanomateriales actuales en cuatro tipos, a saber:

Basados en carbono

Estos nanomateriales están compuestos mayoritariamente por carbono y suelen adoptar formas como esferas huecas, elipsoides o tubos. Los nanomateriales de carbono con forma elipsoidal o esférica se conocen como fullerenos, mientras que los cilíndricos reciben el nombre de nanotubos¹.

Basados en metales

Estos nanomateriales incluyen diferentes composiciones, usualmente son las más demandadas las nanopartículas de oro, plata, cobre y algunos óxidos metálicos como el dióxido de titanio

Dendrímeros

Estos materiales son polímeros de tamaño nanométrico contruidos a partir de unidades ramificadas. La superficie de un dendrímero tiene numerosos extremos de cadena, que se pueden adaptar para desempeñar funciones químicas específicas.

Compuestos

Los compuestos combinan las nanopartículas con otras nanopartículas o con materiales de mayor tamaño¹.

Agave potatorum.

Son plantas monocotiledóneas, polimórficas, la altura media de la planta adulta es 0.54m (del nivel del suelo al cono central de hojas), tiene más de 60 hojas avadas dispuestas en una roseta pequeña compacta (diámetro aproximado de

0.78m), lanceoladas, succulentas de color verde a verde-glaucas, son angostas con una longitud promedio de 34cm (medida de la base al extremo apical). Los tallos de las plantas maduras son apreciados porque son usados en la elaboración de mezcal, sobre todo en los valles centrales de Oaxaca, presentan un intervalo amplio de peso entre 35 y121 kg. ³

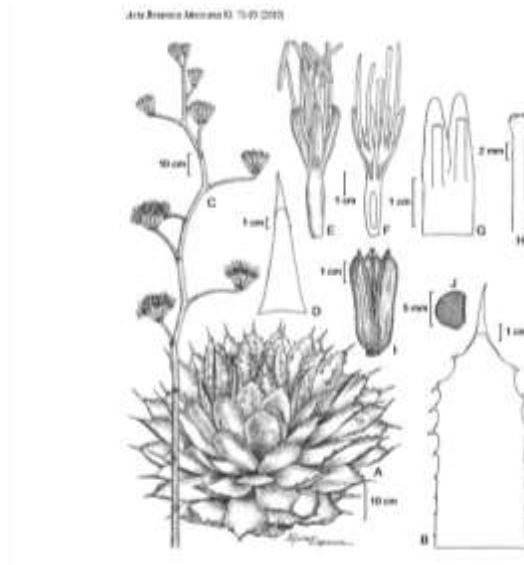


Imagen 1.2 características del agave potatorum.

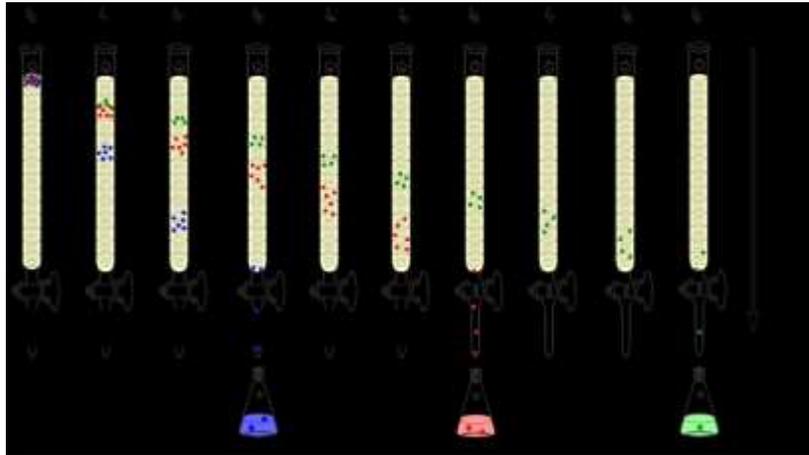
García, A (2010), REVISIÓN TAXONÓMICA DEL COMPLEJO AGAVE POTATORUM ZUCC. (Investigación) - (Imagen.) ³

Cromatografía.

Cromatografía de adsorción (líquido-sólido)

La fase estacionaria es un adsorbente y la separación se basa en repetidas etapas de adsorción y desorción, la fase móvil es un disolvente o mezcla de disolventes y la fase estacionaria un sólido que interactúa con las sustancias que se desea separar (cromatografía líquido-sólido). Esta forma de cromatografía puede realizarse con diferentes arreglos experimentales: en columna, en capa delgada o en papel. En el primer caso, la fase estacionaria se encuentra rellenando un tubo; en el segundo, se dispersa sobre una lámina de vidrio o aluminio formando un lecho de espesor uniforme; en la

cromatografía en papel, la fase estacionaria es la solución acuosa contenida en el interior de las celdas formadas por las fibras de la celulosa, y es por tanto una forma de cromatografía (líquido- líquido).⁴



4

Imagen 1.3 fases de la cromatografía de columna.

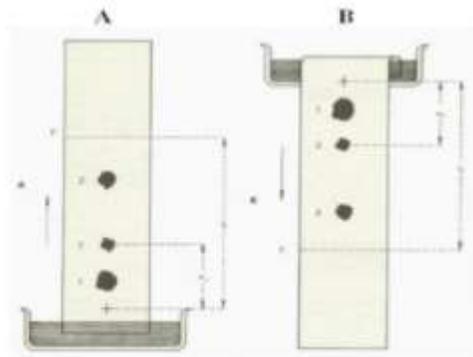
Recuperada de glosarios.servidor-alicante.com

Cromatografía en papel.

La cromatografía en papel es un proceso muy utilizado en los laboratorios para realizar análisis cualitativos ya que pese a no ser una técnica potente no requiere de ningún tipo de equipamiento. La fase estacionaria está constituida simplemente por una tira de papel de filtro. La muestra se deposita en un extremo colocando pequeñas gotas de la disolución y evaporando el disolvente. Luego el disolvente empleado como fase móvil se hace ascender por capilaridad. La separación se realiza en función de la afinidad de los solutos con las dos fases, las más solubles en agua se quedarán cerca del punto donde se aplicó la muestra, y las menos solubles en agua y más solubles en el disolvente llegarán más lejos. Las sustancias separadas se identifican mediante diversos procedimientos físicos o químicos. La cromatografía en papel es una técnica utilizada para análisis inorgánico cualitativo, permite

llevar a cabo la separación e identificación de iones, trabajando con cantidades mínimas de sustancia. ⁶

Pertenece al tipo de “Cromatografía de partición” se fundamenta en que las sustancias problema, pueden tener diferentes coeficientes de reparto en dos disolventes de inmiscibilidad limitada, uno permanece fijo en la superficie del papel “fase estacionaria” generalmente en agua, la fase móvil constituida generalmente por una mezcla de disolventes parcialmente miscibles en ella. Hay varios tipos de cromatografía, la ascendente (papel hacia arriba), descendente (papel invertido), radial y de separación de zonas y sectores



A.- Cromatografía ascendente.
B.- Cromatografía descendente.

Imagen 1.4 cromatografía en papel. ⁶

Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Química Analítica Instrumental II
Técnicas Cromatográficas diciembre de 2007 (pág. 3)

Al entrar en contacto con los disolventes empieza su fase de movilidad lo que produce unas manchas características sobre el papel, generalmente, estas no son coloreadas y se revelan con una lámpara fluorescente, los contornos se marcan con lápiz. Como medida en cromatografía sobre papel se emplea el R_f (Retention factor), el cual se define como el cociente de dividir el recorrido de la sustancia por el disolvente, esto es, la distancia media desde el origen hasta el centro de la mancha (X) dividida por la distancia que media desde el origen hasta el frente del disolvente (S). ⁶

$$R_f = X \quad [1]$$

En la cromatografía en papel se utiliza como fase estacionaria una hoja de papel de celulosa de elevada pureza recubierta de una capa de agua asociada a las fibras de celulosa. La fase móvil, en la que irá disuelta la muestra, se forma por disolventes cuya naturaleza se elige en función de los componentes que se pretenden separar.⁶

Cromatografía en capa fina

La cromatografía en capa fina se basa en la preparación de una capa, uniforme, de un adsorbente mantenido sobre una placa de vidrio u otro soporte. Los requisitos esenciales son, pues, un adsorbente, placas de vidrio, un dispositivo que mantenga las placas durante la extensión, otro para aplicar la capa de adsorbente, y una cámara en la que se desarrollen las placas cubiertas. Es preciso también poder guardar con facilidad las placas preparadas y una estufa para activarlas. La fase móvil es líquida y la fase estacionaria consiste en un sólido. La fase estacionaria será un componente polar y el eluyente será por lo general menos polar que la fase estacionaria, de forma que los componentes que se desplacen con mayor velocidad serán los menos polares. Polaridad de los compuestos orgánicos en orden creciente: Hidrocarburos < olefinas < flúor < cloro < nitro < aldehído aldehído < éster < alcohol < cetonas < aminas < ácidos < amidas.

La cromatografía en capa fina presenta una serie de ventajas frente a otros métodos cromatográficos (en columna, en papel, en fase gaseosa) ya que el utillaje que precisa es más simple. El tiempo que se necesita para conseguir las separaciones es mucho menor y la separación es generalmente mejor. Pueden usarse reveladores corrosivos, que sobre papel destruirían el cromatograma. El método es simple y los resultados son fácilmente reproducibles, lo que hace que sea un método adecuado para fines analíticos. Al realizar la elección del adsorbente se debe tener en cuenta el tamaño de

las partículas del adsorbente, cuanto más finamente dividido esté mayor será su adhesión al soporte, aunque también se le puede añadir un adherente.⁶

En la elección del eluyente influyen varios factores:

- Precio.
- Pureza.
- No utilizar mezclas de eluyentes (reproducibilidad).
- No utilizar compuestos muy volátiles.
- Evitar que contengan trazas de metales (catalizadores).

La elección del eluyente se realiza de forma empírica. Hay que estudiar la polaridad del componente y probar con eluyentes cada vez menos polares.⁴

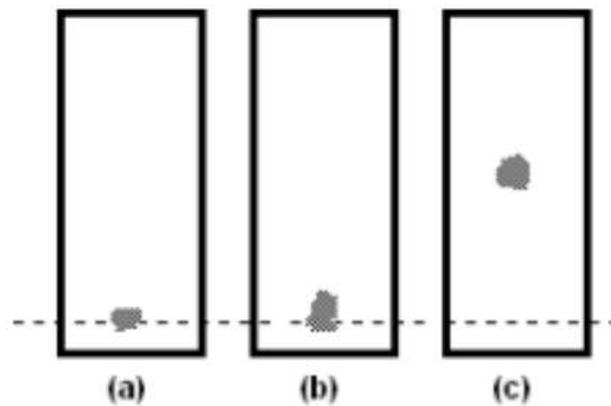


Imagen 1.5 corrido de placas de cromatografía de capa fina.

Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Química Analítica Instrumental II
Técnicas Cromatográficas Diciembre de 2007 (pág. 4)⁶

Generalmente se utiliza como reactivo revelador yodo, el cual forma complejos coloreados con los componentes orgánicos (con tonos amarillo-marrón), pero las manchas desaparecen con el tiempo con lo que es conveniente señalar las manchas aparecidas. Otro reactivo revelador bastante utilizado es el ácido sulfúrico, que reacciona con los componentes orgánicos produciendo

manchas negras. Sin embargo debe tenerse en cuenta que el tamaño de las manchas no está relacionado con la cantidad de componente separado.⁶



Imagen 1.6 revelado de placas de cromatografía de capa fina.

Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Química Analítica Instrumental II
Técnicas Cromatográficas Diciembre de 2007 (pág. 5)⁶

Disolventes utilizados para la cromatografía.

Acetato de etilo

FORMULA: $C_4H_8O_2$, $CH_3COOCH_2CH_3$

PESO MOLECULAR: 88.1 g/mol

COMPOSICION: C: 54.53 %, H: 9.15 % y O: 36.32 %.

GENERALIDADES: El acetato de etilo es un líquido incoloro con olor a frutas, inflamable, menos denso que el agua y ligeramente miscible con ella. Sus vapores son más densos que el aire. Se obtiene por destilación lenta de una mezcla de ácido acético, alcohol etílico y ácido sulfúrico, o bien, a partir de

acetaldehído anhidro en presencia de etóxido de aluminio. Se usa en esencias artificiales de frutas, como disolvente de nitrocelulosa, barnices y lacas, en la manufactura de piel artificial, películas, placas fotográficas, seda artificial, perfumes y limpiadores de telas, entre otros.⁷

Hexano

FORMULA: C_6H_{14} PESO MOLECULAR: 86.17 g/mol

COMPOSICION: C: 83.62 %, H: 16.38 %.

GENERALIDADES: El hexano es un líquido incoloro con un olor parecido al del petróleo. Es menos denso que el agua e insoluble en ella, sus vapores son más densos que el aire. El producto comercial generalmente contiene otros productos hidrocarbonados como isómeros de seis carbonos, benceno, algunos compuestos de 5 y 7 carbonos y otros con azufre, oxígeno, cloro o dobles ligaduras, aunque en menor proporción. Se obtiene del petróleo. Por destilación de fracciones de las que se obtienen gasolinas o a través de reformados catalíticos, por medio de los que se obtienen compuestos aromáticos. Una forma de obtener n-hexano de gran pureza es pasarlo a través de malla molecular, en la cual se retienen la n-parafinas y eluyen las ramificadas, cíclicas y compuestos aromáticos. Un posterior cambio de temperatura y/o presión, permite recuperar las parafinas lineales. En el caso de contener impurezas con dobles ligaduras u otros elementos como azufre, oxígeno o halógenos, entonces la purificación debe llevarse a cabo mediante hidrogenación. Forma parte de la gasolina de automóviles y es utilizado en la extracción de aceite de semillas, como disolvente en reacciones de polimerización y en la formulación de algunos productos adhesivos, lacas, cementos y pinturas. También se utiliza como desnaturizante de alcohol y en termómetros para temperaturas bajas, en lugar de mercurio. Por último, en el laboratorio se usa como disolvente y como materia prima en síntesis.⁸

Espectrofotometría UV-Vis

La espectrofotometría UV-visible es una técnica analítica que permite determinar la concentración de un compuesto en solución. Se basa en que las moléculas absorben las radiaciones electromagnéticas y a su vez que la cantidad de luz absorbida depende de forma lineal de la concentración. Para hacer este tipo de medidas se emplea un espectrofotómetro, en el que se puede seleccionar la longitud de onda de la luz que pasa por una solución y medir la cantidad de luz absorbida por la misma.

El fundamento de la espectroscopía se debe a la capacidad de las moléculas para absorber radiaciones, entre ellas las radiaciones dentro del espectro UV-visible. Las longitudes de onda de las radiaciones que una molécula puede absorber y la eficiencia con la que se absorben dependen de la estructura atómica y de las condiciones del medio (pH, temperatura, fuerza iónica, constante dieléctrica), por lo que dicha técnica constituye un valioso instrumento para la determinación y caracterización de biomoléculas. Las moléculas pueden absorber energía luminosa y almacenarla en forma de energía interna. Esto permite poner en funcionamiento ciclos vitales como la fotosíntesis en plantas y bacterias. Cuando la luz (considerada como energía) es absorbida por una molécula se origina un salto desde un estado energético basal o fundamental, E_1 , a un estado de mayor energía (estado excitado), E_2 . Y sólo se absorberá la energía que permita el salto al estado excitado. Cada molécula tiene una serie de estados excitados (o bandas) que la distingue del resto de moléculas. Como consecuencia, la absorción que a distintas longitudes de onda presenta una molécula -esto es, su espectro de absorción constituye una señal de identidad de la misma. Por último, la molécula en forma excitada libera la energía absorbida hasta el estado energético fundamental.

$$E_2 - E_1 = h\nu$$

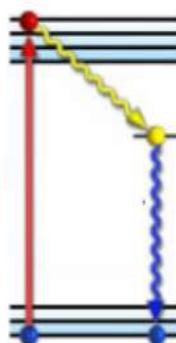


Imagen 1.7 Diagrama de niveles de energía en una molécula. La absorción de energía luminosa hace que la molécula pase desde un estado fundamental (E1) a otro excitado (E2). Posteriormente la molécula relaja su energía mediante distintos mecanismos (vibración, rotación, etc.)⁹

En espectroscopia el término luz no sólo se aplica a la forma visible de radiación electromagnética, sino también a las formas UV e IR, que son invisibles. En espectrofotometría de absorbancia se utilizan las regiones del ultravioleta (UV cercano, de 195-400 nm) y el visible (400-780 nm).⁹

longitud de onda aproximada	color de luz que se absorbe	color de luz que se refleja o ve
390 - 435	Violeta	Amarillo verdoso
435 - 490	Azul	Amarillo
490 - 580	Verde	Rojo
580 - 595	Amarillo	Azul
595 - 650	Naranja	Azul verdoso
650 - 780	Rojo	Verde azulado

Imagen 1.8 longitudes de onda donde se absorben los colores.⁹

La región UV se define como el rango de longitudes de onda de 195 a 400 nm. Es una región de energía muy alta. Provoca daño al ojo humano así como quemadura común. Los compuestos con dobles enlaces aislados, triples enlaces, enlaces peptídicos, sistemas aromáticos, grupos carbonilos y otros heteroátomos tienen su máxima absorbancia en la región UV, por lo que ésta es muy importante para la determinación cualitativa y cuantitativa de compuestos orgánicos. Diversos factores -como pH, concentración de sal y el

disolvente- que alteran la carga de las moléculas, provocan desplazamientos de los espectros UV. La fuente de radiación ultravioleta es una lámpara de deuterio.⁹

En la región visible apreciamos el color visible de una solución y que corresponde a las longitudes de onda de luz que transmite, no que absorbe. El color que absorbe es el complementario del color que transmite. Por tanto, para realizar mediciones de absorción es necesario utilizar la longitud de onda en la que absorbe luz la solución coloreada. La fuente de radiación visible suele ser una lámpara de tungsteno y no proporciona suficiente energía por debajo de 320 nm.⁹

Transmitancia y Absorbancia

Cuando un rayo de luz de una determinada longitud de onda de intensidad I_0 incide perpendicularmente sobre una disolución de un compuesto químico que absorbe luz o cromóforo, el compuesto absorberá una parte de la radiación incidente (I_0) y dejará pasar el resto (I_t), de forma que se cumple: $I_0 = I_a + I_t$.⁹

La Transmitancia (T) de una sustancia en solución es la relación entre la cantidad de luz transmitida que llega al detector una vez que ha atravesado la muestra, I_t , y la cantidad de luz que incidió sobre ella, I_0 , y se representa normalmente en tanto por ciento: $\% T = I_t/I_0 \times 100$ La Transmitancia nos da una medida física de la relación de intensidad incidente y transmitida al pasar por la muestra. La relación entre %T y la concentración no es lineal, pero asume una relación logarítmica inversa.⁹

La absorbancia (A) es un concepto más relacionado con la muestra puesto que nos indica la cantidad de luz absorbida por la misma, y se define como el logaritmo de $1/T$, en consecuencia: $A = \log 1/T = -\log T = -\log I_t/I_0$. Cuando la intensidad incidente y transmitida son iguales ($I_0 = I_t$), la Transmitancia es del 100% e indica que la muestra no absorbe a una determinada longitud de onda, y entonces A vale $\log 1 = 0$.⁹

Obtención de un espectro de absorción

El espectro de absorción es una representación gráfica que indica cantidad de luz absorbida (ϵ) a diferentes valores de λ . A partir de una solución diluida de un compuesto, cuya absorbancia máxima entra dentro del rango de medida del espectrofotómetro, se verá el valor de absorbancia a diferentes longitudes de onda frente a un blanco que contenga el disolvente de la solución de la muestra a caracterizar. A partir del espectro de absorción se obtendrá el valor de λ al que el compuesto presenta la mayor absorbancia (λ_{max}). Dicho λ se utilizará a la hora de hacer determinaciones cualitativas y cuantitativas del compuesto.

El espectro de absorción de un cromóforo depende, fundamentalmente, de la estructura química de la molécula.⁹

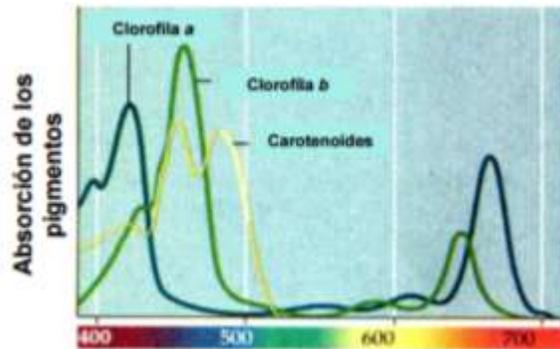


Imagen 1.9 absorción de algunos pigmentos.

Metodología.

Materiales Cromatografía de columna.

Sobrenadante del extracto del *agave potatorum*.

Columna para cromatografía.

Sílice.

Hexano

Acetato.

Tubos de ensaye.

Vasos de precipitado. (Varios volúmenes)

Procedimiento

Se montó una columna cromatográfica con sílice y el extracto del *Agave potatorum*, siendo así una cromatografía (líquido-sólido), el extracto se mezcló con sílice hasta que tomó la misma consistencia (soporte de muestra), se llenó la columna de sílice hasta aproximadamente $\frac{3}{4}$ de la misma, incluyendo la muestra soportada, el espacio que se dejó libre se utiliza para agregar los disolventes con los cuales se bajó la columna en este caso comenzamos a bajarla con hexano puro (para asentar espacios y compactar la columna).



Imagen 2.1 inicio de la cromatografía de columna.

Antes de comenzar a bajar la columna nos aseguramos de que no tuviera espacios ya que esto provocaría que nuestra columna se fracturara y fuera más difícil bajarla.

Después de haber revisado todo perfectamente aseguramos nuestra columna a nuestro soporte universal y comenzamos a agregar las mezclas eluyentes (Hexano/ Acetato 9:1, 8:2; Acetato, Acetona, Etanol).

Colocamos en tubos de ensaye lo que bajaba de nuestra columna enumerándolos.



Imagen 2.2 tubos de ensaye enumerados.

Para la primera fase esperamos aproximadamente 27 tubos, aunque solo teníamos que esperar 2 y observar si bajaba, aproximadamente a partir de tubo 5 dejó de bajar pero como esperamos 27 tubos los leímos en el espectrofotómetro, los juntamos en 2 fases diferentes porque tenían diferente longitud de onda y lo llamamos fase 1 y 2.

Para seguir bajando la columna utilizamos solución 9:1 hexano acetato, con esta solución comenzó a bajar de nuevo, leímos 1 tubo de cada 5 aproximadamente para observar las longitudes de onda y los que tenían la misma los juntamos en un vaso de precipitado, como resultado obtuvimos las fases 3, 4, 5, 6 y 7.



Imagen 2.3 cambio en la columna, por el cambio de sustancia.

Cuando deo de bajar comenzamos a utilizar solución 8:2 hexano acetato, y conseguimos las fases 8, 9, 10 y 11 con el mismo procedimiento.



Imagen 2.4 cambio de sustancia y cambio en la columna cromatográfica.

Después de esperar y notar que ya no bajaba, cambiamos la solución por acetato de etilo y con esto conseguimos las fases 12 y 13, siguiendo siempre el procedimiento de leer los tubos en el espectrofotómetro y separar por longitud de onda.

Una vez obtenidas las 13 fases realizamos cromatografía de capa fina.

Materiales Cromatografía de capa fina.

13 fases obtenidas de la columna.

Placas de sílice.

Solución hexano acetato 9:1.

Solución hexano acetato 8:2.

Acetato.

Acetona.

Pipetas Pasteur.

Pinzas.

Vasos de precipitado de 50ml.

Procedimiento

Ocupamos placas CCM Gel de Sílice 60 F₂₅₄ de 2X4 cm, le dibujamos 2 puntos a la primera placa como referencia para poder agregar las fases, con la pipeta Pasteur tomamos un poco de la fase 1 y la pusimos sobre el primer punto luego la dejamos secar y repetimos el procedimiento, así sucesivamente con las fases 2.

Antes de correr la placa observamos con la lámpara UV si es que se habían marcado los puntos, después de verificar que los puntos estuvieran presentes,

agregamos un poco de hexano a un vaso de precipitado de 50 ml y corrimos la placa.

Repetimos el proceso para la fase 3, 4, 5, 6 y 7 solo que esta vez la placa la corrimos con hexano acetato 9:1.

Para las fases 8, 9, 10 y 11 utilizamos hexano acetato 8:2 como fase móvil.

Y para las fases 12 y 13 ocupamos acetato.

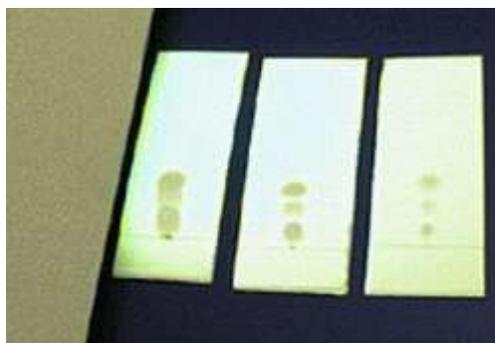


Imagen 2.5 placas de cromatografía ya corridas.

Revelado de placas.

Agregamos un poco de yodo sublimado a un vaso de precipitado y lo tapamos, lo dejamos sublimar aproximadamente por 15 minutos y fuimos metiendo una a una las placas obtenidas.

Material concentración de fases.

Manta de calentamiento.

Matraz de bola con 3 bocas.

Termómetro

Bala de agitación.

Una vez terminada la cromatografía concentramos las fases para deshacernos del hexano y el acetato.



Imagen 2.6 concentración de fases.

Una vez evaporada cada fase agregamos un poco de acetona y limpiamos bien el matraz y el producto lo pusimos en tubos de ensaye.

Materiales lectura espectrofotómetro UV/Vis

Celdas de cuarzo

Acetona

Espectrofotómetro UV/Vis Perkin Elmer.

13 fases.

Procedimiento.

Iniciamos el sistema operativo del espectrofotómetro, le pusimos las condiciones y agregamos las muestras que corrimos.

Antes de comenzar a correr las muestras, corrimos un blanco de acetona para descartar la acetona de nuestras fases.

Comenzamos a correr las fases y nos salieron diferentes absorbancias de cada una, con esto pudimos observar que la separación de nuestras fases fue correcta.



Imagen 2.7 espectrofotómetro UV-Vis.

Resultados.

Obtuvimos 259 tubos de ensaye de los cuales pudimos separar 13 fracciones de las cuales solo utilizamos las fracciones de interés (6, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11 y 12).

Y obtuvimos las siguientes gráficas.

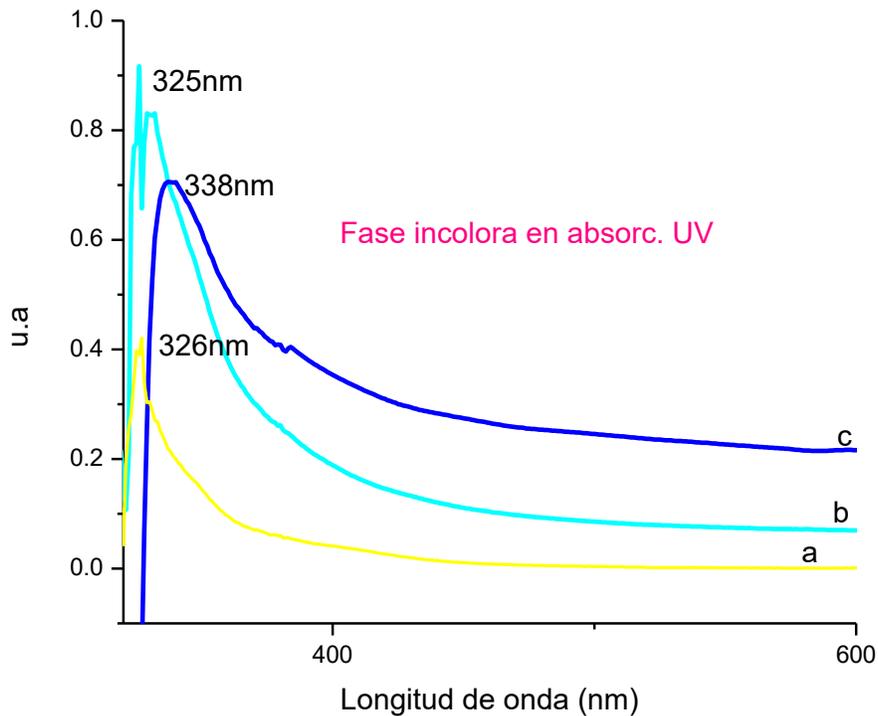


Imagen 3.1 Gráfica 1

En esta grafica podemos observar las 3 fases menos polares, que se obtuvieron con hexano-acetato 9:1.

Es posible que en estas fracciones estén presentes terpenoides y alquenos, pero sin embargo las elegimos porque son de nuestras fracciones mas puras.

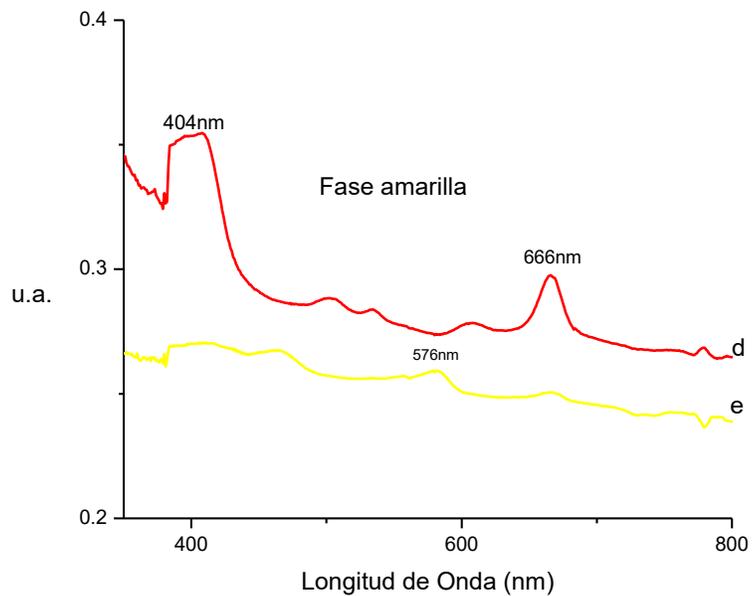


Imagen 3.2 Gráfica 2

En esta grafica podemos observar las fases más o menos polares que son las 7 y 8, es posible que en estas fracciones se encuentren flavonoides, además de que el eluyente que se utilizo fue hexano-acetato 8:2.

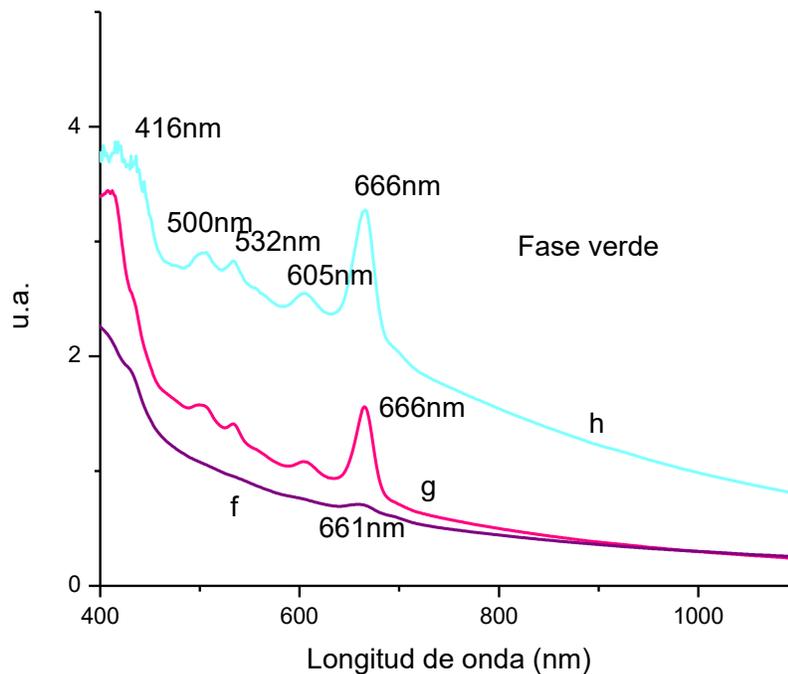


Imagen 3.3 Gráfica 3

En esta grafica podemos observar que ya existe una presencia de azucares y clorofilos porque ya tiene una señal en la región visible. Estas fracciones se obtuvieron con el eluyente acetato de etilo.

En las cromatografías de capa fina obtuvimos los siguientes resultados:

Fase 1	No tenía nada.
Fase 2	Tenía 2 cosas.
Fase 3	Tenía 2 cosas una igual al 2
Fase 4	Tenía 2 cosas 1 igual al 3
Fase 5	Tenía 2 cosas 1 igual al 3
Fase 6	Tenía 2 cosas 1 igual al 4
Fase 7	Tenía 2 cosas 1 igual al 5
Fase 8	Tenía 2 cosas
Fase 9	Tenía 2 cosas.
Fase 10	Tenía 2 cosas iguales al 8
Fase 11	Tenía 3 cosas.
Fase 12	Tenía 3 cosas 1 igual a la 11
Fase 13	Tenía 3 cosas 1 igual a la 11

Imagen 3.4 tabla de resultados.

Discusión de resultados.

Cuando terminamos el proceso de espectrofotometría nos dimos cuenta de que todas nuestras fracciones eran diferentes por lo cual decidimos solo utilizar las de nuestro interés.

Como se muestra en los resultados solo utilizamos las de mayor pureza, es importante observar que la polaridad cambio conforme al eluyente utilizado (hexano, hexano acetato 9:1, hexano acetato 8:2 y acetato), siendo así las más polares las que se obtuvieron por medio de acetato de etilo.

En las últimas fracciones (f, g y h) además de tener mayor polaridad se muestra una banda en la región visible, esto nos da a pensar que existe la presencia de clorofila y por eso no da una señal en la región visible.

Las demás fracciones son incoloras.

Posteriormente nos dedicaremos a la identificación exacta de los metabolitos obtenidos, para este proceso utilizaremos resonancia magnética la cual nos permitirá caracterizar cada uno de los metabolitos extraídos del *agave potatorum*.

Bibliografía

1. Díaz, F. (2012) *INTRODUCCIÓN A LOS NANOMATERIALES (3ra edición)*. UNAM
2. González, A. (2015). ¿Qué es nanotecnología? Recuperado 27 septiembre 2016, de Blog de nanotecnología desde chile Sitio web: <http://www.nanotecnologia.cl/que-es-nanotecnologia/2/>
3. García, A. (2010) *REVISIÓN TAXONÓMICA DEL COMPLEJO AGAVE POTATORUM ZUCC.* (Investigación).
4. Hernández, E. (2016) *Cromatografía* Recuperado 28 septiembre 2016, de glosario química, Sitio web: <http://glosarios.servidor-alicante.com/quimica/cromatografia>.
5. Romero, S. (2002) *CROMATOGRAFÍA Curso de Métodos (2da edición)*. INSTITUTO DE BIOTECNOLOGÍA, UNAM.
6. Universidad Nacional Autónoma de México (2007). *Técnicas Cromatográficas (1era edición)* Facultad de Química, Química Analítica Instrumental II.
7. UNAM. *Ficha de seguridad de hexano* Recuperado 28 Septiembre 2016, de química UNAM, sitio web : <http://www.quimica.unam.mx/IMG/pdf/13hexano.pdf>.
8. UNAM. *Ficha de seguridad de acetato de etilo* Recuperado 28 septiembre 2016, de química UNAM, sitio web: <http://www.quimica.unam.mx/IMG/pdf/8acetatodeetilo.pdf>¹
9. Owen, T. (2000). *fundamentos de la espectroscopia (1era edición)* Agilent Technologies.



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA METROPOLITANA DE
PUEBLA

“EXTRACCIÓN, IDENTIFICACIÓN Y CLASIFICACIÓN DE
METABOLITOS DE PLANTAS DE LA REGIÓN II”

Laboratorio de Nanobiotecnología

Alumna: Ana Paola García Mexicano

INGENIERÍA EN BIOTECNOLOGÍA

ASESOR INDUSTRIAL: Dr. Alejandra Tovar Corona

ASESOR ACADÉMICO: MC José Luis Juárez Figueroa

Puebla, Pue., a 3 de Octubre del 2016

DICTAMEN DE APROBACIÓN

Dra. Alejandra Tovar Corona
Asesora Industrial

M.C. José Luis Juárez Figueroa
Asesor Académico

Ana Paola García Mexicano
Alumna

Índice

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 OBJETIVO GENERAL	2
1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	2
2. MARCO TEÓRICO	2
2.1 <i>Agave potatorum</i>	2
2.2 Cromatografía.....	5
2.2.1 Cromatografía líquida- sólido	5
2.2.2 Cromatografía en capa fina	6
2.2.3 Cromatografía en columna	8
2.3 Espectrofotometría Uv Visible.....	9
2.3.1 Transmitancia y absorbancia	11
3. METODOLOGÍA	12
3.1 CROMATOGRAFÍA EN COLUMNA.....	12
3.1.1 Materiales utilizados	12
3.1.2 Sustancias utilizadas	12
3.1.2 Procedimiento	12
3.2 CROMATOGRAFÍA EN CAPA FINA	16
3.2.1 Materiales utilizados	16
3.2.2 Procedimiento	16
4. RESULTADOS	18
5. DISCUSIONES	22
6. CONCLUSIONES	23
7. Bibliografía	¡Error! Marcador no definido.

TABLA DE ILUSTRACIONES

Figura 1. <i>Agave potatorum</i> Zucc.....	5
Figura 2. Método de cromatografía en capa fina	7
Figura 3. Polaridad de los eluyentes.....	7
Figura 4. Cromatografía en capa fina	9
Figura 5. Naturaleza ondulatoria.....	11
Figura 6. La luz UV-visible	11
Figura 7. Columna cromatográfica con 2 fases1¡Error! Marcador no definido.	
Figura 8. Tuvos de ensayos enumerados y etiquetados.1¡Error! Marcador no definido.	
Figura 9. Recorrido del analito con hexano/acetato 9:1.....	15
Figura 10. Evaporación del disolvente	16
Figura 11. Placas observadas con Lámpara UV.	17
Figura 12. Revelado de placas con yodo sublimado.....	18
Figura 13. Gráfica de Fracciones 1	20
Figura 14. Gráfica de Fracciones 2.....	21
Figura 15. Gráfica de Fracciones 3.....	22

1. INTRODUCCIÓN

La búsqueda de nuevos métodos de síntesis de nanopartículas metálicas es una necesidad creciente debido a que se espera mejorar la eficiencia de los ya existentes, así como la minimización de sus efectos en el medio ambiente. La síntesis de materiales a escala nanométrica es un proceso complejo y muchas veces requiere un alto consumo de reactivos químicos, lo que implica un elevado coste además del daño ambiental asociado.

Para solventar estos problemas surge la biosíntesis de nanopartículas como alternativa a los métodos clásicos de síntesis. Esta se basa en la reducción de metales mediante especies naturales con poder antioxidante en lugar de reductores químicos.

La búsqueda de tecnologías amigables con el medio ambiente ha permitido el desarrollo de investigaciones dirigidas hacia lo que se define como “síntesis verde”. Uno de los pilares fundamentales de la síntesis verde es la utilización de plantas para la obtención de extractos con alto poder antioxidante como polifenoles, azúcares reducidos, bases nitrogenadas y aminoácidos, capaces de reducir cationes en una disolución de sal metálica.

Mediante métodos cromatógrafos se puede identificar, separar y caracterizar los distintos metabolitos que contiene plantas como el agave, y sus distintas propiedades puesto que se puede obtener un gran beneficio al extraer sus compuestos. Ya que la cromatografía funciona como un controlador de la velocidad de cada sustancia que constituye la mezcla, logrando así su separación y mediante el uso de un detector, su caracterización química.

1.1 OBJETIVO GENERAL

Extraer e identificar metabolitos obtenidos de extractos de vegetales por técnicas cromatográficas y a través de espectrofotometría UV-Vis.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- ❖ Obtener metabolitos de interés biotecnológico de extractos vegetales con potencial capacidad reductora.
- ❖ Identificar la pureza de las fracciones obtenidas por cromatografía en capa fina (TLC).
- ❖ Clasificar las fracciones obtenidas mediante espectroscopia UV-Vis de acuerdo a su longitud de onda de absorción máxima.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 Agaves

Los Agaves son plantas endémicas de América de distribución tropical y subtropical, frecuentemente presentes en zonas de clima árido, de las que el mayor número de especies son originarias de nuestro país. Como género, son muy adaptables a diferentes tipos de condiciones climáticas por lo que son relativamente fáciles de cultivar con un mínimo consumo de agua si se comparan con la mayoría de cultivos con mayor demanda comercial. En México, se ha aprovechado tradicionalmente este recurso natural utilizando diferentes partes de las plantas: las fibras de sus hojas permiten fabricar cuerdas (Verduzco-Martínez, 2009).

Y la parte central del cuerpo rico en azúcares sirve para preparar miel y edulcorantes sustitutos de azúcar o para la alimentación del hombre o animales, la savia se utiliza para preparar bebidas como el Aguamiel y Pulque y las plantas completas para la elaboración de Mezcal o Tequila (Verduzco-Martínez, 2009).

Entre las especies más conocidas está el *A. angustifolia* por su alto volumen de producción, y *A. potatorum* (especie silvestre) por generar un mezcal de alta demanda. La especie pertenece al grupo Hiemiflorae caracterizado por presentar hojas ovadas a ampliamente lanceoladas, glaucas, con el margen dentado, inflorescencia paniculada a racemosa, flores agrupadas en umbelas, en ocasiones congestionadas, densamente bractéolas, tépalos más largos que el tubo y filamentos insertados a la mitad o por arriba del tubo (Fig.1) (García-Mendoza, 2010).

Las plantas por lo general sin súculos y reproducción preferentemente por semilla. El grupo Hiemiflorae contiene 13 especies que se distribuyen del sur de México (Puebla y Veracruz) a Nicaragua (García-Mendoza, 2010).

Agave potatorum fue descrita por Zuccarini en 1832, de plantas enviadas de México por Karwinski y cultivadas en el Jardín Botánico de Munich. Posteriormente, proporcionó información del hábito de crecimiento, medidas de la hoja, forma, tamaño de los dientes y ramificación de la inflorescencia. Probablemente el lugar de procedencia sea por las cercanías de Tehuacán, Puebla, pues fue publicada junto con otros dos agaves del mismo valle: *Agave macroacantha* Zucc, y *A. karwinskii* Zucc (García-Mendoza, 2010).

Gentry reunió bajo *Agave potatorum* a un número altamente variable de plantas que crecen en los estados de Oaxaca y Puebla, al no encontrar caracteres morfológicos que se correlacionaran de manera consistente, aplicó un concepto amplio para la especie. Después se realizaron numerosos recorridos de

campo para observar las plantas en su hábitat, herborizar un mayor número de ejemplares y cultivar especímenes ex situ en el Jardín Botánico del Instituto de Biología de la Universidad Nacional Autónoma de México, para así evaluar su comportamiento y descartar una posible plasticidad morfológica (Gentry, 1982).

En la taxonomía se determina una nueva especie y una nueva subespecie para la ciencia reubicando algunos especímenes de *A. potatorum*, ahora considerados dentro de *A. nussaviorum* o *A. seemanniana*. Finalmente, se llegó a la conclusión que se trata de tres especies diferentes (Gentry, 1982).

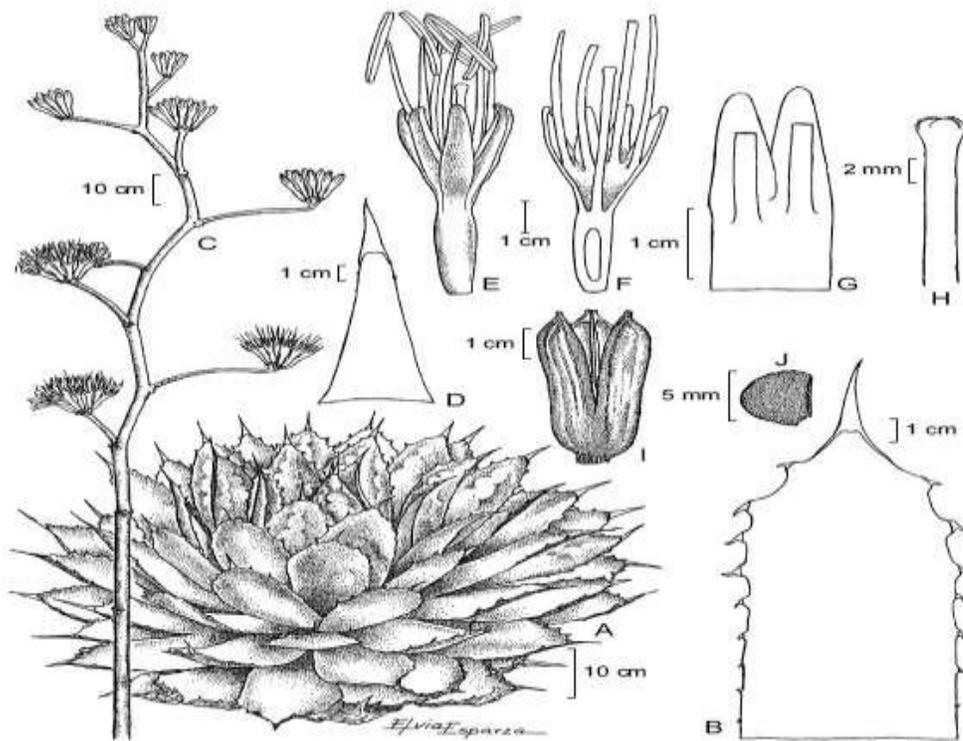


Fig. 1. *Agave potatorum* Zucc. A. roseta: B. hojas: C. inflorescencia: D. bráctea del pedúnculo: E. flor: F. flor disecada: G. detalle de la inserción del filamento. H. estilo y estigma: I. cápsula: J. semilla (García-Mendoza, 2010)

2.2 Cromatografía

En 1906, el botánico Ruso M. Tswett realizó un experimento determinado como cromatografía. Colocó un extracto de pigmentos vegetales en la parte superior de una columna de vidrio rellena de carbonato de calcio (CaCO_3). Al agregar éter, observó que la mezcla original se separaba en diversas bandas coloridas que descendían a través de la columna a diferentes velocidades (Serie Académicos CBS., 2000).

Un rasgo característico de la cromatografía es la presencia de dos fases; dispuestas de tal manera que mientras una permanece estacionaria dentro del sistema (fase estacionaria), la otra se desplaza a lo largo de él (fase móvil). Los componentes más afines a la fase estacionaria avanzan lentamente (más retenidos) mientras que los más afines a la fase móvil (menos retenidos) se mueven con mayor rapidez. El medio cromatográfico (columna, placa o papel) funciona como un controlador de la velocidad de cada sustancia que constituye la mezcla, logrando así su separación y mediante el uso de un detector, su caracterización química (Serie Académicos CBS., 2000).

2.2.1 Cromatografía líquida- sólido

La fase móvil es un disolvente o mezcla de disolventes y la fase estacionaria un sólido que interactúa con las sustancias que se desea separar (cromatografía líquido-sólido). Esta forma de cromatografía puede realizarse con diferentes arreglos experimentales: en columna, en capa delgada o en papel. En el primer caso, la fase estacionaria se encuentra relleno un tubo; en el segundo, se dispersa sobre una lámina de vidrio o aluminio formando un lecho de espesor uniforme. (Serie Académicos CBS., 2000).

2.2.2 Cromatografía en capa fina

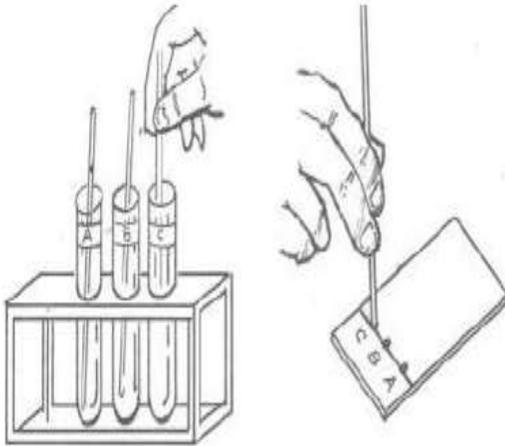


Fig. 2. Método de cromatografía en capa fina (Serie Académicos CBS., 2000).

La cromatografía en capa fina se basa en la preparación de una capa uniforme, de un adsorbente mantenido sobre una placa de vidrio u otro soporte. Los requisitos esenciales son, un adsorbente, placas de vidrio, un dispositivo que mantenga las placas durante la extensión, otro para la introducción a los métodos de separación aplicar la capa de adsorbente, y una cámara en la que se

desarrollen las placas cubiertas (Fig. 2). La fase móvil es líquida y la fase estacionaria consiste en un sólido. La fase estacionaria será un componente polar y el eluyente será por lo general menos polar que la fase estacionaria, de forma que los componentes que se desplacen con mayor velocidad serán los menos polares (Fig.3) (Serie Académicos CBS., 2000).

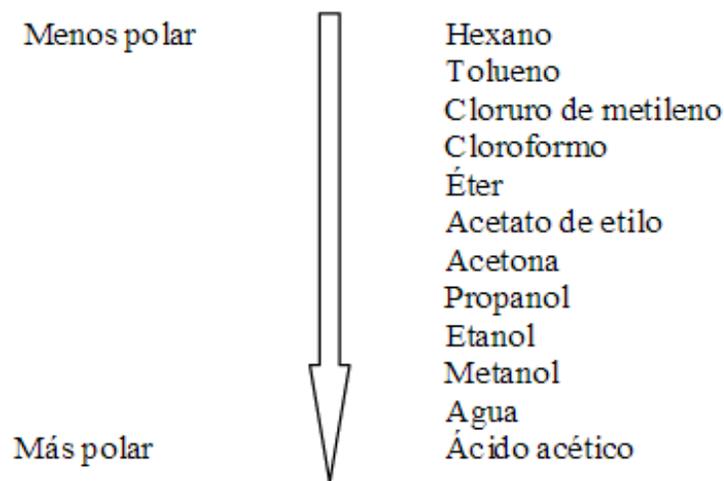


Fig. 3. Polaridad de los eluyentes (Serie Académicos CBS., 2000)

Polaridad de los compuestos orgánicos en orden creciente:

Hidrocarburos < olefinas < flúor < cloro < nitro < aldehído aldehído < éster < alcohol < cetonas < aminas < ácidos < amidas.

La cromatografía en capa fina presenta una serie de ventajas frente a otros métodos cromatográficos, ya que es más simple. El tiempo que se necesita para conseguir las separaciones es mucho menor y la separación es generalmente mejor. El método es simple y los resultados son fácilmente reproducibles, lo que hace que sea un método adecuado para fines analíticos (Serie Académicos CBS., 2000).

Al realizar la elección del adsorbente se debe tener en cuenta el tamaño de las partículas del adsorbente, cuanto más finamente dividido esté mayor será su adhesión al soporte, aunque también se le puede añadir un adherente.

La elección del eluyente se realiza de forma empírica. Hay que estudiar la polaridad del componente y probar con eluyentes cada vez menos polares (Serie Académicos CBS., 2000).

Generalmente se utiliza como reactivo revelador yodo, el cual forma complejos coloreados con los componentes orgánicos (con tonos amarillo-marrón), pero las manchas desaparecen con el tiempo con lo que es conveniente señalar las manchas aparecidas (Fig.4) (García, 2014).



Fig. 4 Cromatografía en capa fina, la placa esta inclinada, la muestra sembrada en el extremo y el disolvente, esto se da en forma descendente
(Serie Académicos CBS., 2000)

2.2.3 Cromatografía en columna

La cromatografía en columna utiliza una columna de vidrio vertical que se llena con un soporte sólido adsorbente (fase estacionaria: los más utilizados son gel de sílice (SiO_2) y alúmina (Al_2O_3)). (HAROLD F WALTON, 2005)

La muestra que se quiere separar se deposita en la parte superior de este soporte. El resto de la columna se llena con el eluyente (disolvente que constituye la fase móvil) que, por efecto de la gravedad, hace mover la muestra a través de la columna. Se establece un equilibrio entre el soluto adsorbido en la fase estacionaria y el disolvente eluyente que fluye por la columna. Debido a que cada uno de los componentes de una mezcla establecerá interacciones diferentes con la fase estacionaria y la móvil, serán transportados a diferentes velocidades y se conseguirá su separación. Las diferencias en las velocidades de desplazamiento a través del medio sólido se corresponden con diferencias en los tiempos de elución por la parte inferior de la columna para cada uno de los componentes de la muestra original, que se recogerán en fracciones diferentes. (Jiménez, 2016)

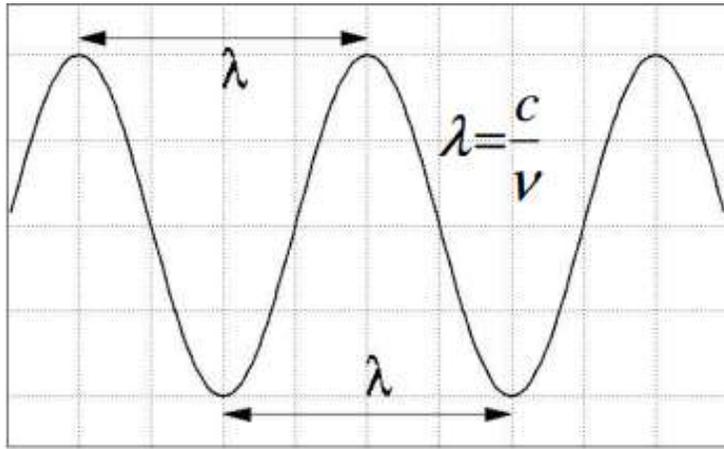
En este tipo de cromatografía, la fase estacionaria utilizada, es decir, el absorbente, se coloca en el interior de una columna de vidrio, la cual finaliza con una llave para controlar el paso de sustancias al exterior de la columna. La fase estacionaria se impregna con el eluyente o fase móvil. El absorbente mayormente utilizado para las cromatografías en columna, es el gel de sílice. A veces, en sustitución del gel de sílice, cuando éste es incompatible con la mezcla, se utilizan la alúmina. La cromatografía en columna puede realizarse por gravedad o a media presión. Cuando se realiza a media presión, se conecta la cabeza de la columna a un compresor o a una línea de aire comprimido (Méndez, 2011).

Cuando se empieza la cromatografía se usa un disolvente excesivamente polar, los componentes de la mezcla eluirán conjuntamente, lo que llevaría a que la separación no tenga lugar. Una de las mezclas de disolventes más utilizadas es hexano/acetato de etilo (Méndez, 2011).

2.3 Espectrofotometría Uv Visible

Se denomina espectrofotometría a la medición de la cantidad de energía radiante que absorbe un sistema químico en función de la longitud de onda de la radiación, y a las mediciones a una determinada longitud de onda (Fig. 5).

La teoría ondulatoria de la luz propone la idea de que un haz de luz es un flujo de cuantos de energía llamados fotones; la luz de una cierta longitud de onda está asociada con los fotones, cada uno de los cuales posee una cantidad definida de energía (Brunatti, 2008)



ν = número de ondas que pasan por un punto en la unidad de tiempo.

λ = distancia que hay entre dos puntos iguales de la onda, máximos, mínimos.

Fig. 5 Naturaleza ondulatoria: caracterizada por su frecuencia (ν) o longitud de onda (λ) (García, s.f.)

Para que la radiación electromagnética incidente, interaccione con la materia tiene que tener una λ del mismo tamaño o menor que las dimensiones del cuerpo irradiado. Es por ello que la radiación de la región del ultravioleta (\approx 1-400 nm) nos permite obtener información de las transiciones electrónicas de las moléculas. (Fig. 6)

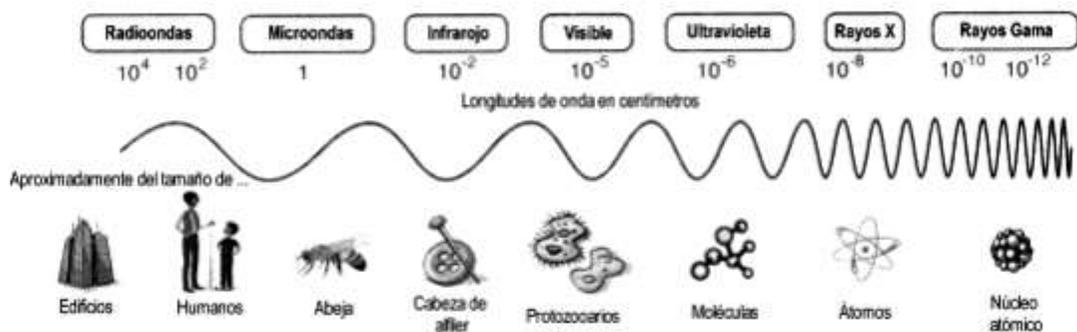


Fig. 6 La luz UV-visible es sólo una pequeña parte del espectro electromagnético, visible (780-380nm); UV (380-200nm) (García, s.f.)

La espectrofotometría UV-Vis se basa en el análisis de la cantidad de radiación electromagnética (en el rango de longitudes de onda del ultravioleta y visible) que puede absorber o transmitir una muestra en función de la cantidad de sustancia presente.

2.3.1 Transmitancia y absorbancia

Cuando la luz atraviesa o se refleja en la muestra, la cantidad de luz absorbida es la diferencia entre la radiación incidente (I_0) y la transmitida (I). La cantidad de luz absorbida se expresa como transmitancia o absorbancia (Owen, 2000).

La transmitancia normalmente se da en términos de una fracción de 1 o como porcentaje, y se define como se indica a continuación:

$$T = I/I_0 \quad \text{o} \quad \% T = (I/I_0) \times 100$$

La absorbancia se define:

$$A = -\log T$$

Para la mayoría de las aplicaciones se utilizan valores de absorbancia, ya que la relación entre ésta y tanto la concentración como el paso óptico es, normalmente, lineal (Owen, 2000).

3. METODOLOGÍA

3.1 CROMATOGRAFÍA EN COLUMNA

3.1.1 Materiales utilizados

Columna para cromatografía, vasos de precipitado de 150 ml, Probeta graduada de 100 ml, Pinzas 3 dedos, Espectrofotómetro UV visible Perkin Elmer, Mantilla de calentamiento.

3.1.2 Sustancias utilizadas

Sílica gel para columna, Acetato de etilo, Hexano, Acetona, Etanol, Yodo, Sobrenadante del extracto de *A. potatorum*.

3.1.2 Procedimiento

Previo al empaquetado de la columna cromatográfica, la sílica gel se sometió a proceso de secado a 80°C por 20 minutos. Una vez cumplido el proceso de secado, la columna de cromatografía se empacó y compactó hasta la marca indicada en la propia columna.

De extractos acuosos de agave, se obtuvo el sobrenadante por centrifugación, que fue mezclado con sílica gel para poder obtener una solución con textura homóloga a la sílica empacada previamente en la columna. La mezcla se colocó en la columna para crear una segunda fase (Fig. 7).



Fig. 7. Columna cromatográfica con 2 fases.

Fueron añadidas pequeñas alícuotas de hexano como eluyente, todo lo que bajaba de la columna se administró en tubos de ensayo, los cuales fueron enumerados y etiquetados (Fig. 8). Después de 27 fracciones, el analito solo corrió 1.5cm desde el punto de partida.



Fig. 8. Tubos con la muestra.

Después se continuó bajando la columna de cromatografía con una solución de hexano/acetato 9:1 para que bajara el analito con mayor velocidad.

El analito recorrió una distancia mayor, (Fig. 9) se comenzó a medir las longitudes de onda de las fracciones en el Espectrofotómetro UV Perkin Elmer visible para determinar la clasificación en fases, de cada una de las muestras, dependiendo los resultados del espectro.

En el Espectrofotómetro primero se corrió el blanco (aire) y después cada una de las muestras en los tubos de ensayo.



Fig. 9. Recorrido del analito con hexano/acetato 9:1

Posteriormente cuando el analito dejó de bajar, se cambió la solución a hexano/acetato 8:2, al final solo se agregó puro acetato para que bajara con mayor velocidad.

Después se midió la longitud de onda de todas las fracciones obtenidas para determinarlos en distintas fases.

Posteriormente se unificaron los tubos según su fase, y se colocaron en un matraz de bola sobre una mantilla de calentamiento para que se evaporara el disolvente de cada fase y así se obtuvo sólo el analito (Fig. 10).



Fig. 10. Evaporación del disolvente

Al final de la evaporación se agregó acetona en el matraz para lograr la concentración de los metabolitos. Este proceso se realizó en cada una de las fases que se obtuvieron.

Por último se midió cada una de las fases en el Espectrofotómetro UV visible Perkin Elmer para comparar y determinar que las fases eran diferentes por medio de su espectro.

Al final se corrió la columna con etanol puro para limpiarla y poder remover la silica gel.

3.2 CROMATOGRAFÍA EN CAPA FINA

3.2.1 Materiales utilizados

Pipeta Pasteur, Placas para cromatografía, acetona, Pinzas, vaso de precipitado de 50ml, Lámpara UV

3.2.2 Procedimiento

Para la realización de cromatografía en capa fina se colocó la muestra del primer y último tubo de ensayo de los 27 obtenidos en una placa de 2cm * 4cm con una pipeta Pasteur.

Después se corrió con hexano en un vaso de precipitado de 50ml. Mediante una Lámpara UV se logró distinguir que se trataba solo de hexano ya que las manchas observadas recorrieron la misma distancia.

Posteriormente se realizó la cromatografía en placa para comparar las fases obtenidas antes de la evaporación.

Cada placa se corrió con el disolvente utilizado en la columna (hexano, hexano/acetato 9:1, hexano/acetato 8:2 y acetato) dependiendo de la fase en la que se encontró.

Después, se observó su desplazamiento por medio de la Lámpara UV (Fig.11). Así se determinó si las fases contenían los mismo compuestos.

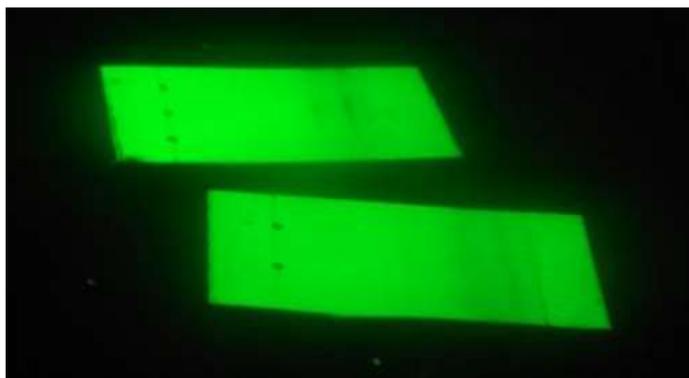


Fig. 11. Placas observadas con Lámpara UV.

Por último, a cada placa se le modificó su polaridad con los eluyentes para posteriormente ser reveladas en una cámara de yodo sublimado y lograr notar a simple vista,el corrido de las muestras (Fig.12)



Fig. 12. Revelado de placas con yodo sublimado

4. RESULTADOS

En los resultados se obtuvieron 13 fases las cuales se determinaron por los espectros obtenidos.

Por medio de las placas se determinó lo siguiente:

Fase	Eluyente	Compuestos observados
1	hexano	Ninguno
2		2 componentes
3	hexano/acetado 9:1	1 componente, igual al de la fase 2
4		1 componente, igual al de la fase 2
5		1 componente, igual al de la fase 2
6		1 componente, igual al de la fase 2
7		1 componente, igual al de la fase 2
8	hexano/acetado 8:2	2 componentes, diferentes
9		2 componentes, diferentes
10		2 componentes, diferentes
11		2 componentes, diferentes
12	acetato	1 componente, igual al de la fase 11
13		1 componente, igual al de la fase 11

Se obtuvieron 259 fracciones de la columna de cromatografía con extracto de *A. potatorum*, las cuales se redujeron por medio de la concentración a 13 fracciones y éstas a su vez se subdividieron en 3 fases con espectrofotometría UV visible.

De las 3 fases obtenidas se determinó que:

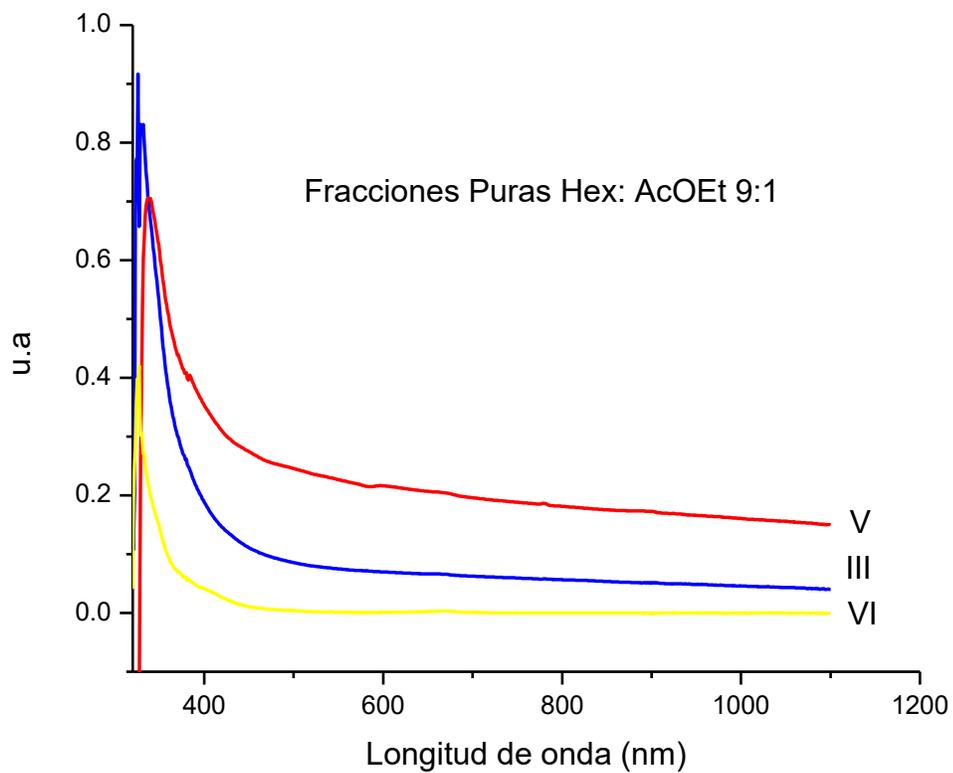


Fig. 13. Gráfica de Fracciones 1

La primera fase fue la menos polar de hexano/acetato 9:1, (Fig. 13) en ésta contenía 3 fracciones VI, III y V las más puras por su longitud de onda.

Se determinó que en esta fase encontramos terpenoides y alquenos ya que no dan señal en una región visible por esa razón son incoloras.

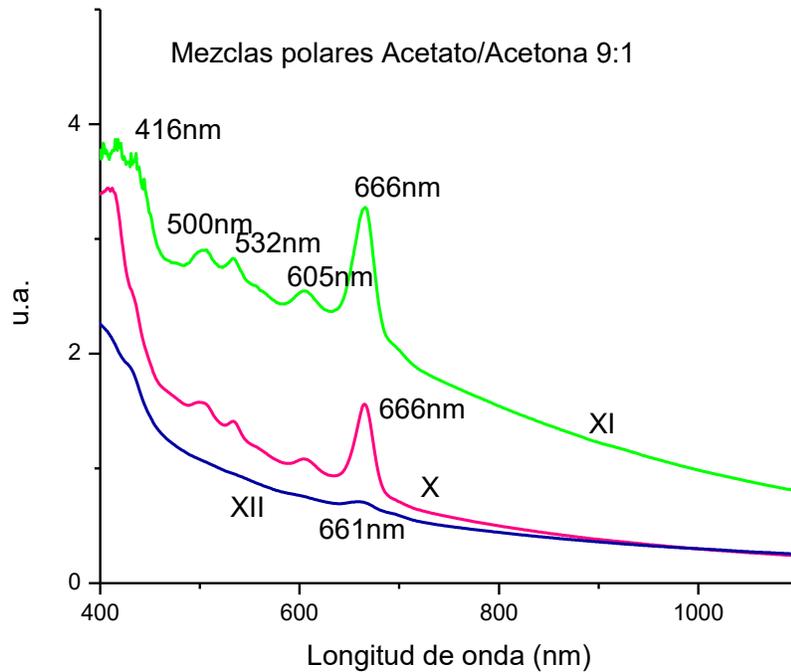


Fig. 14. Gráfica de Fracciones 2

La segunda fase fue medianamente polar hexano/acetato 8:2, (Fig. 14) se encontraron 2 fracciones más notables por su pureza VIII y IX. Ya que por el rango en el que se encontraron se determinó que contienen flavonoides ya que tenían color amarillento.

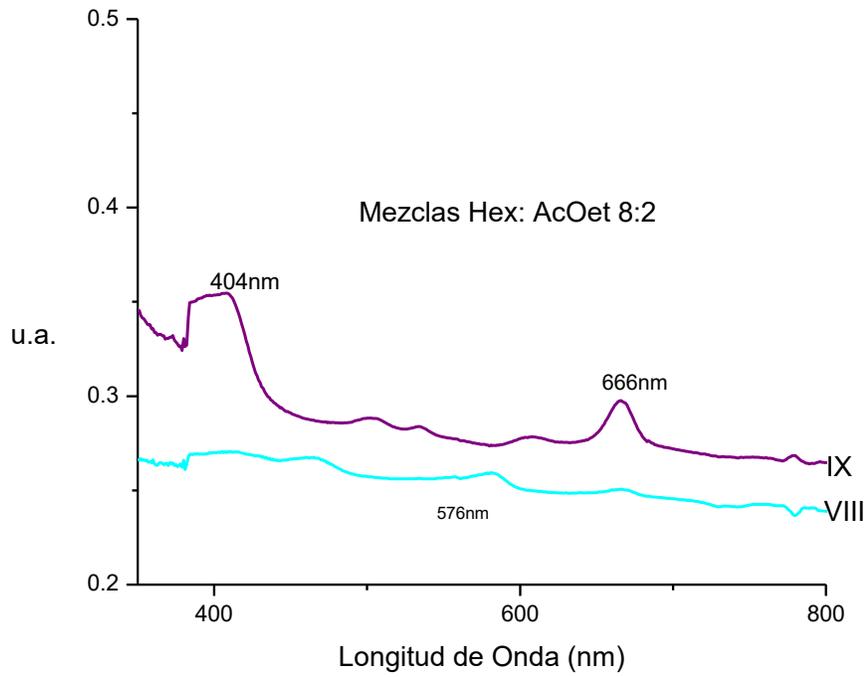


Fig. 15. Gráfica de Fracciones 3

La tercera fase de acetato fue la más polar, (Fig. 15) contenía las fracciones XI y XII. Se obtuvo una banda de absorción entre los 400nm y 700nm en ésta región se observó el color verde el cual determina que tiene azúcares y clorofila.

5. DISCUSIONES

En la parte de la Espectrofotometría resultó que cada una de las fases era diferente, por su longitud de onda, la gráfica contenía cada espectro con una determinada longitud de onda (nm) dependiendo de la polaridad del disolvente utilizado (hexano/acetato de etilo 9:1, hexano/acetato de etilo 8:2 y acetato de etilo).

Gracias a ésta, logramos comprobar que las longitudes de ondas determinan con gran precisión el color de la sustancia, ya que al alcanzar ciertos rangos de longitud de ondas, se notaba el color de la muestra porque ya se localizaban en la región colora.

Por lo cual utilizamos las que tuvieron mayor grado de pureza, ya que nuestro interés era conocer en que rango se encontraban los metabolitos del extracto de *A. potatorum*.

Posteriormente utilizaremos otro procedimiento para identificar con exactitud qué tipo de metabolitos se encontraron en la planta, sería por medio de Resonancia Magnética la cual nos permitirá caracterizar cada uno de los metabolitos extraídos.

6. CONCLUSIONES

Sé logró determinar mediante la cromatografía en columna y en placa fina, cada uno de los metabolitos que contiene el extracto de *A. potatorum*.

Además, por medio del espectrofotómetro, se separó y clasificó de forma adecuada los las fases de extracto de *A. potatorum* conforme a su banda longitud de onda.

Gracias a éstas técnicas se consiguió identificar y clasificar los distintos compuestos del extracto acuoso de la planta.

Con éste proyecto logré aprender a manipular de forma adecuada e interpretar mejor los resultados obtenidos de ciertos instrumentos de laboratorio como el Espectrofotómetro Uv visible, ya que anteriormente solo lo había utilizado en muy pocas ocasiones.

Además aprendí a realizar cromatografía en capa fina con mayor facilidad y con resultados exactos.

También siento que me ayudó mucho el trabajo en equipo, ya que por medio de la comunicación todos los resultados fueron mejores

Bibliografía

1. Brunatti, C. (2008). Obtenido de <http://materias.fi.uba.ar/6305/download/Espectrofotometria.pdf>
2. García, J. (9 de SEPTIEMBRE de 2014). *uam.es*. Obtenido de <https://www.uam.es/docencia/jppid/documentos/practicas/actuales/gui-on-p6.pdf#page=1&zoom=auto,-130,848>
3. García, T. (s.f.). *quimi apuntes*. Obtenido de <http://www.uhu.es/tamara.garcia/quiml/apuntes/TEMA%203.pdf>
4. García-Mendoza, A. J. (2010). *REVISIÓN TAXONÓMICA DEL COMPLEJO AGAVE POTATORUM ZUCC. (AGAVACEAE): NUEVOS TAXA Y NEOTIPIFICACIÓN*. México, D.F. México.
5. Gentry, H. S. (1982). *Agaves of continental North America*. University of Arizona Press.
6. HAROLD F WALTON, J. R. (2005). *ANÁLISIS QUÍMICO E INSTRUMENTAL MODERNO*. BARCELONA, ESPAÑA: REVERTÉ.
7. Jiménez, B. (2016). *scribd*. Obtenido de <https://es.scribd.com/doc/309703801/La-Cromatografia-en-Columna-Utiliza-Una-Columna-de-Vidrio-Vertical-Que-Se-Llena-Con-Un-Soporte-Solido-Adsorbente>
8. Méndez, A. (18 de julio de 2011). *La Guía*. Obtenido de <http://quimica.laguia2000.com/general/cromatografia-en-columna>
9. Owen, T. (2000). *FUNDAMENTOS DE LA ESPECTROSCOPIA UV VISIBLE MODERNA*. Alemania: Agilent Technologies.
10. Serie Académicos CBS. (2000). *Cromatografía de gases y de líquidos de alta resolución*. México.
11. Verduzco-Martínez, J. (2009). CARACTERIZACIÓN E IDENTIFICACIÓN TAXONÓMICA DEL MAGUEY. *RESPYN*, 75,76.



Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla

VALIDACIÓN Y MODELACIÓN DE UN BIOFILTRO REDUCTOR DE CROMO HEXAVALENTE MEDIANTE TÉCNICAS MATEMÁTICAS (ESTADÍSTICA)

Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla.

Estadía.

Alumno: Sánchez Flores Josué

Ingeniería en Biotecnología

Asesor industrial

Dra. Alejandra Tovar Corona

Asesor académico

Mtro. Jesús Luciano Solís Flores.

Puebla, Puebla 03 de diciembre de 2017



Dictamen de aprobación

Puebla, Puebla, 03 de diciembre de 2017

ASESOR INDUSTRIAL

DRA. ALEJANDRA TOVAR CORONA

PROFESORA DE TIEMPO COMPLETO UPMP

ASESOR ACADEMICO

MTRO. JESÚS LUCIANO SOLÍS FLORES

SANCHEZ FLORES JOSUE

ESTUDIANTE INGENIERÍA EN BIOTECNOLOGÍA.



Agradecimientos.

Al finalizar el desarrollo de este proyecto en el cual he obtenido un mayor conocimiento del esperado junto con diversas experiencias gratificantes, es un placer utilizar estos momentos para reflexionar y agradecer a todas aquellas personas e instituciones que hicieron esto posible.

En primer lugar, agradezco a la Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla por permitirme ingresar a esta cálida institución que cuenta con buenos docentes los cuales han hecho posible la obtención de diversos conocimientos, que a su vez me han permitido desarrollar un gran periodo de estadías.

Le agradezco a la Dra. Alejandra Tovar Corona la cual me ha aceptado en su grupo de trabajo para realizar el periodo de estadía correspondiente al último ciclo de formación, sin ella esto no hubiera sido posible. La Dra. Alejandra Tovar ha fortalecido de gran manera en este periodo de estancia ayudándome a desarrollar diferentes tipos de conocimientos tanto en la teoría como en la aplicación, su paciencia y tenacidad han enriquecido y complementado la formación de buenos ingenieros por ello no me queda más que expresarle mi total gratitud.

Quiero expresar también mi más sincero agradecimiento al Maestro Jesús Luciano Solís Flores por su apoyo y confianza en el asesoramiento de esta estancia, el maestro fue indispensable guiando a la resolución de las dudas o problemas que se presentaban en el trayecto de la susodicha.

El más profundo agradecimiento a mi madre, dado que es gracias a su apoyo que logre concluir este último ciclo de formación, su paciencia y motivación son una gran influencia para conseguir cualquier cosa, desde luego agradezco a esa fuerza que nos motiva, nos sostiene, nos deja racionalizar para encontrar y aplicar las mejores soluciones posibles a cualquier situación que enfrentemos.



Índice.

1	Introducción.....	1
1.1	Antecedentes ^[L] _[SEP]	2
1.2	Definición del problema.....	3
1.3	Objetivo.....	3
1.4	Objetivos específicos.....	3
1.5	Justificación.....	4
2	Fundamentos ^[L] _[SEP]	5
2.1	Descripción del área del proyecto ^[L] _[SEP]	5
2.2	Teoría aplicable.....	5
2.2.1	Tabla 1 Análisis de varianza.....	17
3	Método aplicado.....	19
3.1.1	Tabla 2. Datos para la regresión.....	19
3.1.2	Tabla 3. Datos para la regresión.....	24
3.1.1	Tabla 4. Datos para la regresión.....	28
3.1.2	Tabla 5. Datos para la regresión.....	29
3.1.3	Tabla 6. Datos para la regresión.....	33
3.1.1	Tabla 7. Datos para la regresión.....	38
3.1.2	Tabla 8. Datos para la regresión.....	39
3.1.3	Tabla 9. Datos para la regresión.....	43
3.1.1	Tabla 10. Datos para la regresión.....	48
4	Resultados ^[L] _[SEP]	49
4.1.1	Tabla 11. Tabla de regresión lineal con una concentración en ppm.....	49
4.1.1	Tabla 12. Análisis de varianza.....	50



4.1.2	Tabla 13. Resultados de la regresión.....	50
4.1.3	Tabla 14. Análisis de varianza.	50
4.1.4	Tabla 15. Residuos.	51
4.1.5	Tabla 16. Análisis de regresión.	56
4.1.6	Tabla 17. Análisis de varianza.	57
4.1.7	Tabla 18. Estadísticos de la regresión.	57
4.1.8	Tabla 19. Análisis de varianza.	58
4.1.9	Tabla 20. Residuos.	58
4.1.10	Tabla 21. Regresión lineal.....	63
4.1.11	Tabla 22. Análisis de varianza.....	64
4.1.12	Tabla 23. Estadísticos de la regresión	64
4.1.13	Tabla 24. Análisis de varianza.....	65
4.1.14	Tabla 25. Residuos.	65
4.1.15	Tabla 26. Regresión lineal.....	70
4.1.16	Tabla 27. Análisis de varianza.....	71
4.1.17	Tabla 28. Estadísticos de regresión.	71
4.1.18	Tabla 29. Análisis de varianza.....	71
4.1.19	Tabla 30.	72
4.1.20	Tabla 31. Tabla de regresión.....	77
4.1.21	Tabla 32. Análisis de varianza.....	78
4.1.22	Tabla 33. Estadísticos de regresión	78
4.1.23	Tabla 34. Análisis de varianza.....	79
4.1.24	Tabla 35. Residuos.	79



4.1.25	Tabla 33. Regresión lineal.....	84
4.1.26	Tabla 34. Análisis de varianza.....	85
4.1.27	Tabla 35. Estadísticos de regresión.....	85
4.1.28	Tabla 36. Análisis de varianza.....	85
4.1.29	Tabla 37. Residuos	86
4.1.30	Tabla 38. Resultados del modelo teórico manual.....	91
4.1.1	Tabla 39. Resultados del modelo teórico manual.	91
4.1.1	Tabla 40. Resultados del modelo experimental.	91
5	Conclusiones ^{SEP}	92
6	Bibliografía.....	95



1 Introducción.

A través de la historia de la humanidad ha sido imprescindible la interacción con distintos tipos de sistemas, en la última época la sociedad ha experimentado cambios en la educación, debido a que el conocimiento obtenido por las nuevas generaciones deben ser productivo y aplicable, esto hace un énfasis en la construcción de modelos matemáticos debido a que no es posible realizar procesos técnicos en ausencia de ellos (Perez J. A., 2017).

En un sistema real, un modelo matemático es empleado para resolver una problemática determinada con base en la interpretación que se obtenga del sistema o fenómeno, por ello es conveniente hacer un análisis del proceso delimitando las fronteras del mismo junto con sus variables, enfocado a resolver o modelar la situación de interés. De esta manera se aplicara la formulación del problema como lo es la contaminación de suelos y efluentes. (Aravena, Caamaño, & Jiménez, 2007).

Es posible implementar software para resolver sistemas de ecuaciones o modelar y simular procesos o tratamientos, esto con el fin de reducir el error que existe en el tratamiento. Los programas especializados para modelar permiten obtener los valores con mayor facilidad, sin embargo, estos se ven limitados en ocasiones por poseer una gran cantidad de información de forma automática que distrae del resultado esperado (Gómez S. , 2014).

Existe una gran diversidad de desechos que se encuentran en suelos, aguas superficiales y aire dentro de las zonas urbanas dentro de ellos se encuentran los contaminantes metálicos, estos constituyen un riesgo importante debido al grado en el que se pueden dispersar en mantos acuíferos de los cuales la población emplea para su consumo. El cromo hexavalente Cr (VI) constituye un gran riesgo a la salud



pública y ambiental debido a que es un componente altamente tóxico, este elemento se encuentra presente en distintos residuos industriales como la metalurgia, galvanoplásticas o el curtido de pieles, esta última funge como uno de los principales agentes contaminantes de efluentes debido a las descargas de sólidos y líquidos que se caracterizan por poseer elevadas cantidades de materia orgánica y de cromo debido a las sales son generadas por los distintos procesos al que se somete el curtido de pieles (Porras, 2010).

1.1 Antecedentes

Siendo las matemáticas un lenguaje universal y una de las principales herramientas que el ser humano ha implementado para mejorar distintos procesos para su beneficio que van desde la generación de nuevos fármacos hasta la comunicación entre personas que se encuentran en distintas partes del mundo, el lenguaje matemático ha permitido mejorar el entendimiento del medio que nos rodea permitiéndonos manipularlo con distintos fines. Por ello la necesidad de llevar a cabo la modelación matemática de un fenómeno surge a partir de validar que este proceso está ocurriendo bajo condiciones específicas y que son estas variables quienes influyen en gran medida sobre el resultado que se obtendrá.

Por ello, modelar y validar el biofiltro reductor de cromo hexavalente Cr (VI) mediante datos obtenidos de forma experimental permitirá tener una mayor solides al experimento, dado que esta herramienta permite confirmar o rechazar los resultados obtenidos de forma experimental modelando las variables que influyen en este proceso. Sin embargo, habrá que tomar siempre en cuenta que una modelación debe adaptarse al fenómeno que se suscite y no al revés, partiendo de esta necesidad la correcta elección del modelo es fundamental, debido que en ocasiones se requieren varias ecuaciones para resolver un solo problema. Esto se puede resolver mediante la implementación de software específico, dependiendo de las necesidades de la modelación.



1.2 Definición del problema.

Para confirmar los resultados de un fenómeno es indispensable modelar matemáticamente el proceso partiendo de las condiciones que se presenten en el sistema para que este ocurra, la principal disyuntiva es lograr una traducción adecuada y realista el cual englobe todos los componentes claves que el sistema requiere. A partir de ello se propone modelar mediante técnicas matemáticas y estadísticas la reducción de cromo al hacer pasar una solución de este metal por un biofiltro, el cual permite validar este tratamiento, convirtiendo procesos ya existentes desde un punto de vista sustentable.

1.3 Objetivo.

Realizar las modelaciones mediante técnicas matemáticas (estadísticas) a los distintos prototipos de biofiltro tomando como base la ley de Lambert-Beer partiendo de la curva de calibración elaborada de manera experimental, con el fin de obtener el porcentaje teórico de disminución de cromo hexavalente para cada tratamiento.

1.4 Objetivos específicos

Realizar la modelación para cada tratamiento con una concentración de partes por millón (ppm) para obtener su concentración real.

Realizar una modelación para cada tratamiento con una concentración en molaridad con el fin de hallar su concentración molar real.

Evaluar los resultados obtenidos utilizando un software especializado (StatPlus) en estadística y un modelo manual, para saber que tratamiento se ajusta mejor a la realidad.

Definir que herramienta es la más óptima dependiendo de las necesidades que presente el proyecto.



Determinar qué modelo se adapta mejor a la realidad del tratamiento, evaluando las diferencias entre ambos.

1.5 Justificación.

En la elaboración de cualquier proyecto es indispensable confirmar los resultados obtenidos mediante distintas técnicas, una de ellas es la traducción de la realidad a una modelación matemática, al implementar esta herramienta en el proyecto es posible predecir la concentración o absorbancia de la muestra problema (dependiendo de la declaración de las variables) mediante el polinomio característico de la ecuación propuesta cuyo rango se encuentra entre el límite superior e inferior que se deducen a partir de la curva de calibración.

Al implementar esta modelación de la realidad el proyecto adquiere una mejor sustentabilidad económica, es decir disminuye los costos para una posible implementación a mayor escala.

De la misma forma nos permite asegurar con un gran porcentaje de fiabilidad el modelo matemático, disminuyendo el error práctico al momento de ser aplicado.



2 Fundamentos^[SEP]

2.1 Descripción del área del proyecto^[SEP]

Mediante este proyecto se pretende sintetizar una parte de la realidad al lenguaje matemático, con el fin de comprobar los resultados obtenidos de forma experimental en el laboratorio de la universidad, delimitando los componentes del biofiltro en tres aspectos, los cuales fueron probados de manera individual y conjunta, de confirmarse los resultados el proceso contaría con un mayor margen de sustentabilidad teniendo un punto de vista más eco amigable.

2.2 Teoría aplicable.

Siendo una representación abstracta, conceptual o gráfica un modelo matemático permite conocer el resultado final de un sistema a partir de los datos de entrada, considerando su creación como parte fundamental de toda actividad científica. Una de las exigencias de los fenómenos físicos es permitir la reinterpretación de la realidad contra las predicciones del modelo matemático o en sentido inverso. Así estos modelos se pueden catalogar según su información de entrada en heurísticos y empíricos. Los modelos heurísticos se basan en las observaciones y experimentación explicando las causas o mecanismos naturales, mientras que los modelos empíricos son aquellos que emplean las observaciones directas o los resultados del experimento estudiado. Según el tipo de representación se dividen en cuantitativos y cualitativos. Los modelos cualitativos se conforman de una serie de figuras, colores, pero sin magnitud concreta y los modelos cuantitativos están constituidos por formulas, ecuaciones, simulaciones, expresiones y algoritmos que arrojan una solución propuesta al problema con magnitud correcta.

Según su aleatoriedad se manejan dos tipos de modelos los deterministas y estocásticos. Modelo determinista es aquel donde no hay incertidumbre por ello se conocen todos los datos de entrada y salida. Modelo estocástico son análisis probabilísticos donde no se conoce el resultado esperado si no su probabilidad por lo



tanto existe incertidumbre en él (Universidad Complutense de Madrid, 2012).

Según su aplicación de objeto existen modelos de simulación, optimización, control y descriptivo. Modelos de simulación o descriptivos emplea situaciones medibles de manera precisa o aleatoria. Este tipo de modelos pretende predecir que sucede en una situación concreta. Modelos de optimización compara un modelo contra otro para encontrar la predicción óptima a partir de distintos parámetros. Modelo de control hace nuevas medidas y ajustes de parámetros con el fin de decidir cuales se ajustan mejor para lograr el resultado deseado. Modelo descriptivo pormenoriza el modelo real en términos matemáticos exponiendo la situación con mayor claridad con el fin de ajustar o determinar valores correspondientes al fenómeno (Ogata, 1998).

Una de las principales razones para llevar a cabo la modelización en este proyecto es el entendimiento con fenómenos reales, por ello es indispensable elegir y delimitar el problema de estudio, sin embargo, debido a la complejidad de varios fenómenos en especial los biológicos se emplea el reduccionismo metodológico el cual no es más que simplificar la organización de las partes que constituyen el sistema. Una vez delimitadas las fronteras se prosigue a la elección del modelo que mejor se ajuste al fenómeno estudiado, posterior a esto se evalúa la solución y validación del modelo (Gómez C. L., 2015).

Otra parte teórica indispensable al aplicar en este proyecto es la ley de Lambert-Beer-Bouguer, esta ley se puede interpretar como la luz que pasa por un medio que absorbe siendo esta cantidad de luz absorbida correspondiente a la intensidad de luz que incide, repetidamente la intensidad de un haz de luz incidente el cual se declina significativamente a medida que pasa a través del medio absorbente.

Otra forma de comprender la ley de Lambert-Beer-Bouguer es realizando su demostración. En una celda la cual posee una solución con un analito de interés que absorbe energía a una longitud de onda determinada.

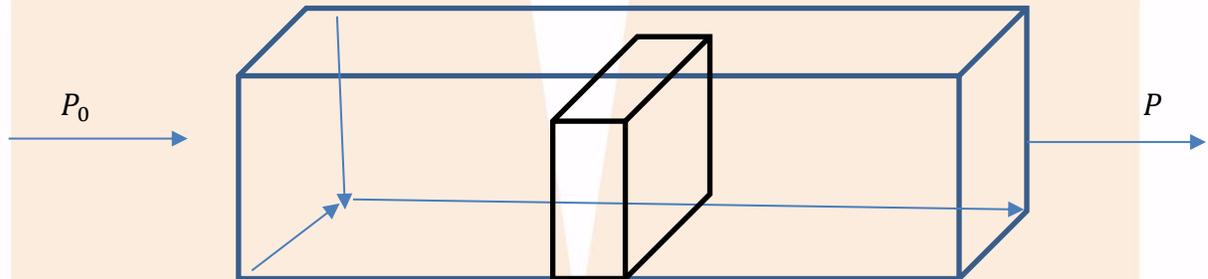


Figura 1. P_0 incide sobre la celda de forma perpendicular atravesando la materia de la solución que contiene el analito con n partículas absorbentes, de esta forma se deduce que la potencia disminuye hasta volverse P por causa de la absorción.

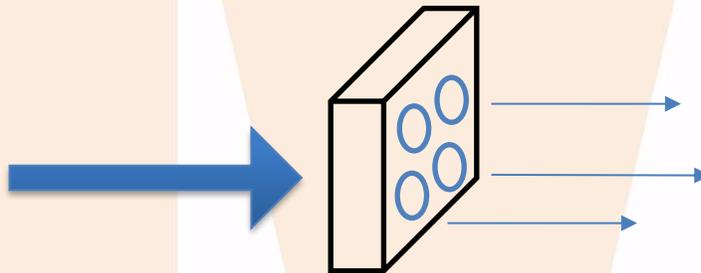


Figura 2. Considerando una sección transversal de la celda y un espesor infinitesimal donde P_x es el diferencial volumen que se deduce como dx , dentro de esta sección quedan atrapadas partículas que absorben la energía mediante la captura de fotones.

Donde:

dx es el diferencial de longitud

dn es el diferencial de partícula



De esta ds es la diferencial de toda el área total o diferencial de superficie asociada a dn que absorbe la radiación.

Por lo tanto, se puede deducir que el diferencial de superficie sobre la superficie total es:

$$\frac{ds}{s} = \frac{dPx}{px} \quad (1)$$

Por lo tanto, se entiende que el diferencial de superficie es proporcional al diferencial de la partícula:

$$ds \propto dn \quad (2)$$

Igualando la ecuación se agrega la constante de proporcionalidad al diferencial de la partícula:

$$ds = dna \quad (3)$$

Reemplazando en la ecuación anterior:

$$\frac{ads}{s} = - \frac{dPx}{px} \quad (4)$$

Resolviendo la ecuación por variables separables tenemos que:

$$\int_0^n \frac{ds}{s} = \int_{P_0}^p \frac{dPx}{px} \quad (5)$$



Resolviendo la integral obtenemos que:

$$\frac{a}{s} n \int_0^n = \int_{P_0}^p \frac{dPx}{px} \quad (6)$$

Evaluando los límites:

$$\frac{a}{s} n = -(LnP - LnP_0) \quad (7)$$

Invirtiendo el cociente:

$$\frac{a}{s} n = -Ln \frac{P}{P_0} \longrightarrow \frac{a}{s} n = Ln \frac{P_0}{P} \quad (8)$$

Aplicando propiedad de logaritmos:

$$Logx = \frac{lnx}{ln10} \longrightarrow \frac{a}{s} n = Ln10 \log \frac{P_0}{P} \quad (9)$$

Despejando:

$$\frac{an}{2.302 * S} = Log \frac{P_0}{P} \quad (10)$$

Expresando el área en función del volumen obtenemos que:

$$V = b * S \quad (11)$$

Donde:

b = Recorrido en cm.

S = Es la superficie o el área de la celda.



Sustituyendo en la expresión anterior:

$$\frac{ab}{2.302 * \frac{n}{V}} = \text{Log} \frac{P_0}{P} \quad (12)$$

Aplicando la ley de medios y extremos.

$$\frac{abn}{2.302 * V} = \text{Log} \frac{P_0}{P} \quad (13)$$

Sustituyendo las partículas en moles para la concentración:

$$c = \frac{n \text{ partículas}}{1L} \alpha \frac{1 \text{ mol}}{6.02 * 10^{23}} = 6.02 * 10^{23} \quad (14)$$

Reemplazando en la ecuación anterior:

$$\frac{ab6.02 * 10^{23}}{2.302} = \text{Log} \frac{P_0}{P} \quad (15)$$

Observando que tanto la constante de proporcionalidad como el número de moles y el logaritmo son constantes se podrán agrupar en ϵ .

Reemplazando en la ecuación obtenemos que la ley de Beer queda:

$$A = ab\epsilon = \text{Log} \frac{P_0}{P} \quad (16)$$

Donde:

ϵ = Coeficiente de proporcionalidad molar, a = concentración molar y b = recorrido en cm. (Universidad EAFIT, 2007)



De acuerdo con la parte experimental anteriormente realizada por nuestro equipo de trabajo se implementó una modelación matemática que fuera útil para describir o explicar de manera teórica los resultados obtenidos por biofiltro reductor de Cr (VI), para ello se propuso evaluar por separado los tres componentes que constituyen al biofiltro los cuales son *Agave potatorum*, *Citrus sinensis* y el ligante L1 Tris. Partiendo de lo anterior, en la parte experimental se obtuvo una curva de calibración, la cual proporciona los datos necesarios para calcular las Absorbancias y concentraciones correspondientes a las muestras o tratamientos. Esta curva de calibración tiene rango que comprende desde 10 a 100 partes por millón (ppm) o una molaridad de $1.697 \cdot 10^{-6}$ a $1.70 \cdot 10^{-5}$ moles de Cr (VI), es conveniente resaltar que estas concentraciones son proporcionales entre sí y que ambas serán utilizadas con el fin de establecer una comparación para cada uno de los tratamientos con el fin de establecer una modelación más cercana a la realidad (Perez, Tovar, Vázquez, & Guevara, 2017).

Utilizando como base la quimiometría que sirve específicamente para aquellos procesos que transforman señales analíticas y datos complejos en información, por esta razón se decidió modelar este sistema implementando la regresión lineal simple que tiene como objetivo expresar de forma matemática el comportamiento de una variable de respuesta en función de una o más variables independientes (López de Alba, López, & Amador, 1997).

Tomando la absorbancia y concentración de la muestra problema obtenidos en la parte experimental se procedió a modelar este sistema a partir del método univariante el cual de manera general emplea un análisis de regresión y un análisis de varianza para una variable independiente relacionado con la Ley de Lambert-Beer la cual se obtiene con la expresión uno donde A es igual a la absorbancia, ϵ es igual al coeficiente de proporción molar b es igual al recorrido en cm. y c es igual a la concentración molar.



Es fundamental que exista un soporte teórico que justifique la modelación del sistema, esto se obtiene a partir de la calibración univariante y su relación con la ley de Lambert-Beer la cual establece una conexión existente entre la absorbancia a una longitud de onda (r_λ) junto con la concentración del analito de interés (C_A), (Ferré, 2005) de esta forma se llega a la siguiente expresión:

$$r_\lambda = \varepsilon_{\lambda,A} | C_A \quad (17)$$

Donde:

$\varepsilon_{\lambda,A}$ = Coeficiente de absortividad de la especie A , a esa longitud de onda.

$|$ = Longitud del camino óptico.

C_A = Concentración del analito de interés.

r_λ = La absorbancia a una longitud de onda.

De esta forma se deduce que para calcular la absorbancia pueden usarse la cualquiera de las siguientes expresiones:

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = \varepsilon b c = \varepsilon_{\lambda,A} | C_A \quad (18)$$

De esta forma se entiende que la absorbancia es igual a menos el logaritmo base diez de la intensidad de la radiación incidente (I_0) que divide a la luz que emerge de la muestra (I), siendo igual al coeficiente de proporcionalidad molar (ε) que multiplica a la longitud de camino óptico (b) y a su concentración molar (c) lo cual es igual a coeficiente de absortividad de la especie A , a esa longitud de onda ($\varepsilon_{\lambda,A}$) multiplicado por la longitud del camino óptico ($|$) y la concentración del analito de interés (C_A). Si el camino óptico es el mismo en todas las medidas los términos de $\varepsilon_{\lambda,A} |$ (εb) se puede agrupar en una constante a la que llamaremos $S_{\lambda,A}$ (Ferré, 2005).



En caso de que existan otras especies en la muestra o tratamiento (disolventes, reactivos, otros analitos) que contribuyan a la absorbancia, se puede calcular con la siguiente expresión:

$$r_{\lambda} = S_{\lambda,A}C_A + S_{\lambda,B}C_B + \dots S_{\lambda,n}C_n \quad (19)$$

La absorbancia a una determinada longitud de onda (r_{λ}) es igual a S_{λ} de la especie A que multiplica a la concentración de la especie A más S_{λ} de la especie B por la concentración de la especie B más la S_{λ} de la especie n por la concentración de la misma especie. Es importante aclarar que, si la contribución de otras sustancias es la misma en los patrones y en las futuras muestras o tratamientos a analizar los términos podrán agruparse como una constante, de esta forma se deduce la siguiente forma:

$$r_{\lambda} = r_{\lambda,0} + S_{\lambda,A}C_A \quad (20)$$

Es posible modelar la participación de $r_{\lambda,0}$ en la regresión sustituyendo en su polinomio característico el cual se puede representar mediante dos variables X y Y , I calcular el comportamiento de Y con respecto de X midiendo el valor de Y contra un conjunto de n valores de X obteniendo n parejas de puntos, de esta forma se deduce que Y es una variable de respuesta o variable aleatoria y X para este caso será la variable independiente al interpretarlo mediante la regresión se puede ajustar un modelo matemático mediante la siguiente expresión:

$$Y = f(X) \quad (21)$$

Así se puede ver si es posible predecir el valor de Y cuando se le da un valor a X suponiendo que hay una correlación lineal entre estas variables obtenemos que cada observación de Y puede ser descrita por el siguiente modelo (Humberto & Vara, 2008):



$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon \quad (22)$$

Una vez ajustada la calibración, al modelar $r_{\lambda,0}$ obtenemos que $\beta_0 = r_{\lambda,0}$ el cual es posible eliminar implementando un blanco al analizar las muestras o tratamientos de esta forma esperaríamos que matemáticamente $\beta_0 = 0$ y así la absorbancia de la muestra solo cambiara debido al analito de la especie A . De manera que para eliminar la interferencia o sesgo en la modelación se busca una longitud de onda específica donde solo absorba el analito de interés.

Por ello para estimar β_0 y β_1 se emplea el método de mínimos cuadrados, utilizando la expresión siete el cual consiste en despejar los errores, elevarlos al cuadrado y sumarlos, obtenemos lo siguiente ecuación:

$$S = \sum_{i=1}^n (e_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y - [\beta_0 + \beta_1 x_i])^2 \quad (23)$$

Este proceso matemático se emplea para minimizar los errores de la expresión ocho de esta forma se obtendrán los estimadores de mínimos cuadrados de β_0 y β_1 el cual consiste en derivar de manera parcial con S con respecto de β_0 y β_1 donde se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_0} = - \sum_{i=1}^n 2(y_i - [\beta_0 + \beta_1 x_i]) \quad (24)$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_1} = - \sum_{i=1}^n 2x_i(y_i - [\beta_0 + \beta_1 x_i]) \quad (25)$$



Al resolver de forma simultánea ambas ecuaciones igualando las a cero con respecto a sus dos incógnitas obtenemos la solución única que se expresa en las siguientes ecuaciones:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} \quad (26)$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} \quad (27)$$

La solución para S_{xy} y S_{xx} se encuentra con las siguientes expresiones:

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sum_{i=1}^n x_i y_i - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)(\sum_{i=1}^n y_i)}{n} \quad (28)$$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)^2}{n} \quad (29)$$

Donde las medias de \bar{x} y \bar{y} se representan por las siguientes formulas:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad (30)$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} \quad (31)$$

Posterior a este proceso se pueden estimar \hat{y}_i a partir de la siguiente expresión:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) \quad (32)$$

Para estimar los residuos se calcula a partir de la diferencia entre lo observado y lo predicho, como se muestra en la siguiente expresión:



$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i \quad (33)$$

Es necesario estimar la varianza del error de ajuste para el modelo, que más adelante servirá para realizar un análisis de varianza de la regresión, por ello se emplea la suma de cuadrados del error la cual es calculada mediante la siguiente expresión:

$$SC_E = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (34)$$

Para modelar la variabilidad no explicada en la recta de regresión se utiliza el cuadrado medio del error se obtiene mediante la siguiente expresión:

$$CM_E = \frac{SC_E}{n - 2} \quad (35)$$

Al sacar la raíz del cuadrado medio del error se obtiene el error estándar de estimación el cual servirá para validar o rechazar las hipótesis que se generen con respecto a la regresión.

Para medir la variabilidad total observada en la variable de respuesta de interés se emplea la siguiente expresión:

$$S_{yy} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (36)$$

La suma de cuadrados de la regresión se utiliza para medir la variabilidad explicada por la recta de regresión y se calcula mediante la siguiente expresión (Humberto & Vara, 2008):

$$SC_R = \beta_1 * S_{xy} \quad (37)$$



Las expresiones anteriores sirven para realizar el análisis de varianza para el modelo de regresión lineal simple y de esta forma conocer si hay una relación directa entre la variable dependiente y la variable independiente, esto dependerá de si se acepta o se rechaza la hipótesis propuesta.

Para analizar la significancia del modelo se realiza la siguiente hipótesis:

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_0: \beta_1 \neq 0$$

Si H_0 resulta ser cierto se empleará el siguiente estadístico:

$$F_0 = \frac{SC_R/1}{SC_E/n-2} = \frac{CM_R}{CM_E} \quad (38)$$

Se rechaza $H_0: \beta_1 = 0$ si el estadístico de prueba es mayor que el valor crítico correspondiente, es decir, se rechaza H_0 si $F_0 > F_{(\alpha,1,n-2)}$.

Para realizar el análisis de varianza con el fin de valorar la significancia del modelo se utilizan expresiones anteriores en la siguiente tabla:

2.2.1 Tabla 1 Análisis de varianza.

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad.	Cuadrado medio.	F_0	VALOR-P
Regresión.	SC_R	1	CM_R	$F_0 = \frac{CM_R}{CM_E}$	$P_r(F > F_0)$
Error o residual.	SC_E	$n - 2$	CM_E		
Total.	S_{Yy}	$n - 1$			



Tabla 1. Muestra el análisis de varianza para el modelo de regresión lineal simple donde se evaluará el estadístico de prueba con respecto al valor crítico correspondiente para aceptar o rechazar la hipótesis propuesta. F_0 distribución F (Montgomery, 2004).

Se decidió realizar la regresión lineal en el software StatPlus debido a que es una herramienta para realizar análisis estadísticos complejos mediante una interfaz sencilla. Cuenta con características similares con la hoja de cálculo de Microsoft Excel o Numbers. Este software permite realizar análisis específicos sin complicados lenguajes de programación dado que, StatPlus permite desarrollar análisis de estadística descriptiva hasta regresiones o análisis de supervivencia, este programa puede utilizarse en conjunto con otras hojas de cálculo ampliando el margen del análisis y ofreciendo una mayor precisión.

Para realizar la regresión en StatPlus se insertan los valores que correspondan a la variable dependiente y a la variable independiente, junto con su título. Posterior a este proceso se posiciona el cursor en la barra de inicio en la parte que indica regresión se da doble clic seleccionando regresión lineal. Se abre una pestaña y se declarando la variable dependiente e independiente. Se selecciona el tipo de gráfico que se desea junto con el análisis de varianza se da clic en aceptar y en otro libro se muestran los resultados de la regresión, la varianza y las gráficas.



3 Método aplicado.

Al realizar la modelación correspondiente al primer tratamiento se utilizó la fibra de agave como principal constituyente del biofiltro, tomando los datos obtenidos de forma experimental que corresponden a la absorbancia y la concentración junto con los datos pertenecientes a la curva de calibración.

A partir de ello fue realizado la regresión lineal simple implementándola como un modelo heurístico y estocástico el cual fue elaborado de forma manual (graficado en Excel) y con el software StatPlus, para generar estos modelos al utilizar la concentración en ppm y posterior en molaridad los cuales se muestran en la siguiente tabla.

3.1.1 **Tabla 2. Datos para la regresión.**

Concentración en ppm (x_i)	Absorbancia (y_i)
100	0.8657
90	0.7747
80	0.6896
70	0.6044
69.594	0.6009
60	0.5354
50	0.4244
40	0.3444
30	0.2559
20	0.1724
10	0.1274

Tabla 2. Los datos de la tabla dos fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i Concentración en partes por millón. y_i absorbancia.

Sustituyendo en las expresiones anteriores para las medias de \bar{x} y \bar{y} obtenemos que:



$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} = \frac{100 + 90 + 80 + 70 + 69.594 + 60 + 50}{11} = 56.32672727$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} = \frac{0.8657 + 0.7747 + 0.6896 + 0.6044 + 0.6009 + 0.5354}{11} = 0.490472727$$

Sustituyendo en las expresiones anteriores para S_{xy} y S_{xx} con concentraciones en ppm obtenemos que:

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)^2}{n} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = (619.594 - 56.32672727)^2 = 317270.0205$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = (619.594 - 56.32672727)(5.3952 - 0.490472727) = 2762.672354$$

Sustituyendo en las expresiones anteriores para β_0 y β_1 podemos deducir que:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{2762.672354}{317270.0205} = 0.008707638$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = 0.490472727 - (0.008707638 * 56.32672727) = 0$$

Para calcular la predicción de y_i se sustituye en la expresión diecisiete obteniendo las siguientes estimaciones:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 100) = 0.870763758$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 90) = 0.783687382$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 80) = 0.696611007$$



$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 70) = 0.609534631$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 69.594) = 0.60599933$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 60) = 0.522458255$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 50) = 0.435381879$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 40) = 0.348305503$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 30) = 0.261229127$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 20) = 0.174152752$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008707638 * 10) = 0.087076376$$

Sustituyendo en la expresión dieciocho encontramos que:

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.8657 - 0.870763758 = -0.0050638$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.7747 - 0.783687382 = -0.0089874$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6896 - 0.696611007 = -0.0070110$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6044 - 0.609534631 = -0.0051346$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6009 - 0.60599933 = -0.0050993$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.5354 - 0.522458255 = 0.0129417$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.4244 - 0.435381879 = -0.0109819$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.3444 - 0.348305503 = -0.0039055$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.2559 - 0.261229127 = -0.0053291$$



$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1724 - 0.174152752 = -0.0017528$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1274 - 0.087076376 = 0.0403236$$

Una vez obtenido el coeficiente de proporcionalidad molar será este el valor que se empleará para modelar solo la parte que nos interesa de la recta, tomando como base la curva de calibración y la ley de Lambert-Beer.

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = \varepsilon b c = \varepsilon_{\lambda, A} | C_A$$

Despejando y utilizando la absorbancia obtenida de manera experimental obtenemos que:

$$c = \frac{A}{b\varepsilon} = \frac{A}{\varepsilon_{\lambda, A} |} = \frac{0.6009}{0.008707638 * 1} = 69.00838423 \text{ ppm}$$

Calculando el porcentaje de disminución de la concentración inicial menos la concentración final:

$$DCr = 100 - 69.00838423 = 30.99161577$$

Al estimar la suma de cuadrados del error se sustituyendo en la expresión diecinueve obtenemos que:

$$SC_E = \sum_{i=1}^n e_i^2 = (1.3877788 * 10^{-16})^2 = 1.92593 * 10^{-32}$$

Para calcular el cuadrado medio del error el cual nos servirá para el análisis de varianza sustituimos en la expresión veinte:

$$CM_E = \frac{SC_E}{n-2} = \frac{1.92593 * 10^{-32}}{11-2} = 2.13992 * 10^{-33}$$



Sustituyendo en la expresión veintidós para la suma de cuadrados de la regresión obtenemos que:

$$SC_R = \beta_1 * S_{xy} = 0.008707638 * 2762.672354 = 24.0563$$

Para analizar la significancia del modelo se realiza la siguiente hipótesis:

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_1: \beta_1 \neq 0$$

Sustituyendo en la expresión veintitrés obtenemos que:

$$F_0 = \frac{SC_R/1}{SC_E/n-2} = \frac{CM_R}{CM_E} = \frac{24.05634962}{2.13992 * 10^{-33}} = 1.12417 * 10^{34}$$

Comparación del estadístico de prueba con respecto del valor crítico obtenido en tablas con distribución F.

$$H_1: \beta_1 \neq 0 \text{ si } F_0 > F_{(0.05,1,9)}.$$

Evaluación del biofiltro en concentración molar tomando como único constituyente del biofiltro la fibra de agave. A continuación, se muestra una tabla en concentración y absorbancia.



3.1.2 **Tabla 3. Datos para la regresión.**

Concentración en Molaridad (x_i)	Absorbancia (y_i)
0.000017	0.8657
0.0000153	0.7747
0.000013576	0.6896
0.000011879	0.6044
0.0000113	0.6009
0.000010182	0.5354
0.000008485	0.4244
0.000006788	0.3444
0.000005091	0.2559
0.000003394	0.1724
0.000001697	0.1274

Tabla 3. Los datos de la tabla tres fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i Concentración en molaridad. y_i absorbancia.

Sustituyendo en las expresiones anteriores con concentración molar para \bar{x} y \bar{y} obtenemos que:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} = \frac{1.70 * 10^{-5} + 1.53 * 10^{-5} + 1.3576 * 10^{-5} + 1.1879 * 10^{-5} + 1.1300 * 10^{-5} + 1.0182 * 10^{-5} + 8.4850 * 10^{-6} + 6.7880 * 10^{-6} + 5.0910 * 10^{-6} + 3.3940 * 10^{-6} + 1.6970 * 10^{-6}}{11} = 9.51227 * 10^{-6}$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} = \frac{0.8657 + 0.7747 + 0.6896 + 0.6044 + 0.6009 + 0.5354 + 0.4244 + 0.3444 + 0.2559 + 0.1724 + 0.1274}{11} = 0.490472727$$

Sustituyendo en las expresiones anteriores para S_{xy} y S_{xx} con concentraciones en molaridad obtenemos que:



$$S_{xx} = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)^2}{n} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = (1.04635 * 10^{-4} - 9.51227 * 10^{-6})^2$$
$$= 9.04833 * 10^{-9}$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = (1.04635 * 10^{-4} - 9.51227 * 10^{-6})(5.3952 - 0.490472727)$$
$$= 4.66551 * 10^{-4}$$

Sustituyendo en las expresiones once y doce:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{4.66551 * 10^{-4}}{9.04833 * 10^{-9}} = 51562.09681$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = 0.490472727 - (51562.09681 * 9.51227 * 10^{-6}) = 0$$

Para calcular la predicción de y_i se sustituye en la expresión diecisiete obteniendo las siguientes estimaciones:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 1.6970 * 10^{-5}) = 0.875008783$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 1.5273 * 10^{-5}) = 0.787507905$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 1.3576 * 10^{-5}) = 0.700007026$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 1.1879 * 10^{-5}) = 0.612506148$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 1.1300 * 10^{-5}) = 0.582651694$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 1.0182 * 10^{-5}) = 0.52500527$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 8.4850 * 10^{-6}) = 0.437504391$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 6.7880 * 10^{-6}) = 0.350003513$$



$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 5.0910 * 10^{-6}) = 0.262502635$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 3.3940 * 10^{-6}) = 0.175001757$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51562.09681 * 1.6970 * 10^{-6}) = 0.087500878$$

Sustituyendo en la expresión dieciocho encontramos que:

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.8657 - 0.875008783 = -0.009308783$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.7747 - 0.787507905 = -0.012807905$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6896 - 0.700007026 = -0.010407026$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6044 - 0.612506148 = -0.008106148$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6009 - 0.582651694 = 0.018248306$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.5354 - 0.52500527 = 0.01039473$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.4244 - 0.437504391 = -0.013104391$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.3444 - 0.350003513 = -0.005603513$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.2559 - 0.262502635 = -0.006602635$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1724 - 0.175001757 = -0.002601757$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1274 - 0.087500878 = 0.039899122$$

Una vez obtenido el coeficiente de proporcionalidad molar será este el valor que se empleará para modelar solo la parte que nos interesa de la recta, tomando como base la curva de calibración y la ley de Lambert-Beer.



$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = \varepsilon bc = \varepsilon_{\lambda,A} | C_A$$

Despejando y utilizando la absorbancia obtenida de manera experimental obtenemos que:

$$c = \frac{A}{b\varepsilon} = \frac{A}{\varepsilon_{\lambda,A} |} = \frac{0.6009}{51562.09681 * 1} = 1.16539 * 10^{-5}$$

Calculando la disminución de la concentración inicial menos la concentración final:

$$DCr = 1.6970 * 10^{-5} - 1.16539 * 10^{-5} = 5.316091 * 10^{-6}$$

Al estimar la suma de cuadrados del error se sustituyendo en la expresión diecinueve obtenemos que:

$$SC_E = \sum_{i=1}^n e_i^2 = (-1.34615 * 10^{-15})^2 = 1.81211 * 10^{-30}$$

Para calcular el cuadrado medio del error el cual nos servirá para el análisis de varianza sustituimos en la expresión veinte:

$$CM_E = \frac{SC_E}{n-2} = \frac{1.81211 * 10^{-30}}{11-2} = 2.01345 * 10^{-31}$$

Sustituyendo en la expresión veintidós para la suma de cuadrados de la regresión obtenemos que:

$$SC_R = \beta_1 * S_{xy} = 51562.09681 * 4.66551 * 10^{-4} = 24.056349$$

Para analizar la significancia del modelo se realiza la siguiente hipótesis:

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_0: \beta_1 \neq 0$$



Sustituyendo en la expresión veintitrés obtenemos que:

$$F_0 = \frac{SC_R/1}{SC_E/n-2} = \frac{CM_R}{CM_E} = \frac{24.05634962}{2.13992 * 10^{-33}} = 1.12417 * 10^{34}$$

Comparación del estadístico de prueba con respecto del valor crítico obtenido en tablas con distribución F.

$$H_1: \beta_1 \neq 0 \text{ si } F_0 > F_{(0.05,1,9)}.$$

Al realizar los cálculos con StatPlus se cambió a la concentración como variable dependiente, tomando el lugar de la variable independiente la absorbancia. Los datos obtenidos para la regresión lineal y el análisis de varianza fueron los siguientes:

3.1.1 Tabla 4. Datos para la regresión

Absorbancia (x_i)	Concentración en molaridad. (y_i)	Concentración en ppm (y_i)
0.8657	0.000017	100
0.7747	0.0000153	90
0.6896	0.000013576	80
0.6044	0.000011879	70
0.6009	0.0000113	69.594
0.5354	0.000010182	60
0.4244	0.000008485	50
0.3444	0.000006788	40
0.2559	0.000005091	30
0.1724	0.000003394	20
0.1274	0.000001697	10

Tabla 4. Los datos de la tabla cuatro fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i absorbancia. y_i Concentración en partes por millón y concentración en molaridad.



Los datos fueron capturados realizando la regresión en StatPlus.

Evaluación del biofiltro en concentración molar tomando como único constituyente del biofiltro la fibra de agave. A continuación, se muestra una tabla en concentración y absorbancia.

Para la modelación que corresponde al segundo tratamiento la composición del biofiltro consta de fibra de agave y la difenilcarbazida. A partir de los datos obtenidos de forma experimental se implementó la regresión lineal utilizando la concentración en ppm y molaridad que se muestran en la siguiente tabla.

3.1.2 Tabla 5. Datos para la regresión.

Concentración ppm (x_i)	Absorbancia (y_i)
100	0.8657
90	0.7747
80	0.6896
70	0.6044
60	0.5354
53.75793799	0.4797
50	0.4244
40	0.3444
30	0.2559
20	0.1724
10	0.1274

Tabla 5. Los datos de la tabla cinco fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i Concentración en partes por millón. y_i absorbancia.

Sustituyendo en las expresiones anteriores para las medias de \bar{x} y \bar{y} obtenemos que:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} = \frac{100 + 90 + 80 + 70 + 60 + 53.75793799 + 50 + 40 + 30 + 20 + 10}{11} = 54.88708527$$



$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} = \frac{0.8657 + 0.7747 + 0.6896 + 0.6044 + 0.5354 + 0.4797}{11} = 0.479454545$$

Sustituyendo en las expresiones anteriores para S_{xy} y S_{xx} con concentraciones en molaridad obtenemos que:

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)^2}{n} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = (603.757938 - 54.88708527)^2 = 301259.213$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = (603.757938 - 54.88708527)(5.3952 - 0.479454545) = 2631.586252$$

Sustituyendo en las expresiones once y doce:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{2631.586252}{301259.213} = 0.008735289$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = 0.479454545 - (0.008735289 * 54.88708527) = 0$$

Para calcular la predicción de y_i se sustituye en la expresión diecisiete obteniendo las siguientes estimaciones:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 100) = 0.873528888$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 90) = 0.786175999$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 80) = 0.69882311$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 70) = 0.611470221$$



$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 60) = 0.524117333$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 53.75793799) = 0.469591118$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 50) = 0.436764444$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 40) = 0.349411555$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 30) = 0.262058666$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 20) = 0.174705778$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008735289 * 10) = 0.087352889$$

Sustituyendo en la expresión dieciocho encontramos que:

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.8657 - 0.873528888 = -0.007828888$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.7747 - 0.786175999 = -0.011475999$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6896 - 0.69882311 = -0.00922311$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6044 - 0.611470221 = -0.007070221$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.5354 - 0.524117333 = 0.011282667$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.4797 - 0.469591118 = 0.010108882$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.4244 - 0.436764444 = -0.012364444$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.3444 - 0.349411555 = -0.005011555$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.2559 - 0.262058666 = -0.006158666$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1724 - 0.174705778 = -0.002305778$$



$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1274 - 0.087352889 = 0.040047111$$

Una vez obtenido el coeficiente de proporcionalidad molar será este el valor que se empleará para modelar solo la parte que nos interesa de la recta, tomando como base la curva de calibración y la ley de Lambert-Beer.

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = \varepsilon b c = \varepsilon_{\lambda, A} | C_A$$

Despejando y utilizando la absorbancia obtenida de manera experimental obtenemos que:

$$c = \frac{A}{b\varepsilon} = \frac{A}{\varepsilon_{\lambda, A} |} = \frac{0.4797}{0.008735289 * 1} = 54.91518446$$

Calculando la disminución de la concentración inicial menos la concentración final:

$$DCr = 100 - 54.91518446 = 45.08481554$$

Al estimar la suma de cuadrados del error se sustituyendo en la expresión diecinueve obtenemos que:

$$SC_E = \sum_{i=1}^n e_i^2 = (-1.94289 * 10^{-16})^2 = 3.77482 * 10^{-32}$$

Para calcular el cuadrado medio del error el cual nos servirá para el análisis de varianza sustituimos en la expresión veinte:

$$CM_E = \frac{SC_E}{n-2} = \frac{3.77482 * 10^{-32}}{11-2} = 4.19425 * 10^{-33}$$

Sustituyendo en la expresión veintidós para la suma de cuadrados de la regresión obtenemos que:

$$SC_R = \beta_1 * S_{xy} = 0.008735289 * 2631.586252 = 24.056349$$



Para analizar la significancia del modelo se realiza la siguiente hipótesis:

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_0: \beta_1 \neq 0$$

Sustituyendo en la expresión veintitrés obtenemos que:

$$F_0 = \frac{SC_R/1}{SC_E/n-2} = \frac{CM_R}{CM_E} = \frac{22.98766612}{4.19425 * 10 - 33} = 5.48076 * 1033$$

Comparación del estadístico de prueba con respecto del valor crítico obtenido en tablas con distribución F.

$$H_1: \beta_1 \neq 0 \text{ si } F_0 > F_{(0.05,1,9)}.$$

Evaluación del biofiltro en concentración molar que corresponde al segundo tratamiento. A continuación, se muestra una tabla que corresponde a la concentración y absorbancia.

3.1.3 Tabla 6. Datos para la regresión.

Molaridad x_i	Absorbancia y_i
0.000017	0.8657
0.0000153	0.7747
0.000013576	0.6896
0.000011879	0.6044
0.000010182	0.5354
0.000009	0.4797
0.000008485	0.4244
0.000006788	0.3444
0.000005091	0.2559
0.000003394	0.1724
0.000001697	0.1274



Tabla 6. Los datos de la seis nueve fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i absorbancia. y_i Concentración en molaridad.

Sustituyendo en las expresiones anteriores con concentración molar para \bar{x} y \bar{y} obtenemos que:

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} = \\ &= \frac{1.70 * 10^{-5} + 1.53 * 10^{-5} + 1.3576 * 10^{-5} + 1.1879 * 10^{-5} + 1.0182 * 10^{-5} + 9.30794 * 10^{-6} + 8.4850 * 10^{-6} + 6.7880 * 10^{-6} + 5.0910 * 10^{-6} + 3.3940 * 10^{-6} + 1.6970 * 10^{-6}}{11} \\ &= 9.30318 * 10^{-6}\end{aligned}$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} = \frac{0.8657 + 0.7747 + 0.6896 + 0.6044 + 0.5354 + 0.4797 + 0.4244 + 0.3444 + 0.2559 + 0.1724 + 0.1274}{11} = 0.479454545$$

Sustituyendo en las expresiones anteriores para S_{xy} y S_{xx} con concentraciones en molaridad obtenemos que:

$$\begin{aligned}S_{xx} &= \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)^2}{n} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = (1.02 * 10^{-4} - 9.30318 * 10^{-6})^2 \\ &= 8.65492 * 10^{-9}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}S_{xy} &= \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = (1.02 * 10^{-4} - 9.30318 * 10^{-6})(5.274 - 0.479454545) \\ &= 4.4605 * 10^{-4}\end{aligned}$$

Sustituyendo en las expresiones once y doce:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{4.4605 * 10^{-4}}{8.65492 * 10^{-9}} = 51536.61992$$



$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = 0.479454545 - (51536.61992 * 9.30318 * 10^{-6}) = 0$$

Para calcular la predicción de y_i se sustituye en la expresión diecisiete obteniendo las siguientes estimaciones:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 1.697 * 10^{-5}) = 0.87457644$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 1.5273 * 10^{-5}) = 0.787118796$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 1.3576 * 10^{-5}) = 0.699661152$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 1.1879 * 10^{-5}) = 0.612203508$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 1.0182 * 10^{-5}) = 0.524745864$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 9.00 * 10^{-6}) = 0.463829579$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 8.485 * 10^{-6}) = 0.43728822$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 6.788 * 10^{-6}) = 0.349830576$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 5.091 * 10^{-6}) = 0.262372932$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 3.394 * 10^{-6}) = 0.174915288$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51536.61992 * 1.697 * 10^{-6}) = 0.087457644$$

Sustituyendo en la expresión dieciocho encontramos que:

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.8657 - 0.87457644 = -0.00887644$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.7747 - 0.787118796 = -0.012418796$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6896 - 0.699661152 = -0.010061152$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6044 - 0.612203508 = -0.007803508$$



$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.5354 - 0.524745864 = 0.010654136$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.5354 - 0.463829579 = 0.015870421$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.4244 - 0.43728822 = -0.01288822$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.3444 - 0.349830576 = -0.005430576$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.2559 - 0.262372932 = -0.006472932$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1724 - 0.174915288 = -0.002515288$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1274 - 0.087457644 = 0.039942356$$

Una vez obtenido el coeficiente de proporcionalidad molar será este el valor que se empleará para modelar solo la parte que nos interesa de la recta, tomando como base la curva de calibración y la ley de Lambert-Beer.

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = \varepsilon bc = \varepsilon_{\lambda,A} | C_A$$

Despejando y utilizando la absorbancia obtenida de manera experimental obtenemos que:

$$c = \frac{A}{b\varepsilon} = \frac{A}{\varepsilon_{\lambda,A} |} = \frac{0.4797}{51536.61992 * 1} = 9.30794 * 10^{-6}$$

Calculando la disminución de la concentración inicial menos la concentración final:

$$DCr = 1.6970 * 10^{-5} - 9.30794 * 10^{-6} = 7.6621 * 10^{-6}$$

Al estimar la suma de cuadrados del error se sustituyendo en la expresión diecinueve obtenemos que:

$$SC_E = \sum_{i=1}^n e_i^2 = (-5.27356 * 10^{-16})^2 = 2.78104 * 10^{-31}$$



Para calcular el cuadrado medio del error el cual nos servirá para el análisis de varianza sustituimos en la expresión veinte:

$$CM_E = \frac{SC_E}{n - 2} = \frac{2.78104 * 10^{-31}}{11 - 2} = 3.09005 * 10^{-32}$$

Sustituyendo en la expresión veintidós para la suma de cuadrados de la regresión obtenemos que:

$$SC_R = \beta_1 * S_{xy} = 51536.61992 * 4.4605 * 10^{-4} = 22.9876661$$

Para analizar la significancia del modelo se realiza la siguiente hipótesis:

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_0: \beta_1 \neq 0$$

Sustituyendo en la expresión veintitrés obtenemos que:

$$F_0 = \frac{SC_R/1}{SC_E/n - 2} = \frac{CM_R}{CM_E} = \frac{22.9876661}{3.09005 * 10^{-32}} = 7.43926 * 10^{32}$$

Comparación del estadístico de prueba con respecto del valor crítico obtenido en tablas con distribución F.

$$H_1: \beta_1 \neq 0 \text{ si } F_0 > F_{(0.05,1,9)}$$

Al realizar los cálculos con StatPlus se cambió a la concentración como variable dependiente, tomando el lugar de la variable independiente la absorbancia. Los datos obtenidos para la regresión lineal y el análisis de varianza fueron los siguientes:



3.1.1 Tabla 7. Datos para la regresión.

Absorbancia (x_i)	Concentración en molaridad. (y_i)	Concentración en ppm (y_i)
0.8657	0.000017	100
0.7747	0.0000153	90
0.6896	0.000013576	80
0.6044	0.000011879	70
0.5354	0.000010182	60
0.4797	0.000009	53.75793799
0.4244	0.000008485	50
0.3444	0.000006788	40
0.2559	0.000005091	30
0.1724	0.000003394	20
0.1274	0.000001697	10

Tabla 7. Los datos de la tabla siete fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i absorbancia. y_i Concentración en partes por millón y concentración en molaridad.

Los datos fueron capturados realizando la regresión en StatPlus.

Para la modelación que corresponde al tercer tratamiento la composición del biofiltro consta de fibra de agave y la difenilcarbazida. A partir de los datos obtenidos de forma experimental se implementó la regresión lineal simple, tanto en Excel como en StatPlus utilizando la concentración en ppm y molaridad que se muestran en la siguiente tabla.



3.1.2 Tabla 8. Datos para la regresión.

Concentración x_i	Absorbancia y_i
100	0.8657
90	0.7747
80	0.6896
70	0.6044
60	0.5354
50	0.4244
40	0.3444
30	0.2559
20	0.1724
10	0.1274
4.16013	0.053

Tabla 8. Los datos de la tabla ocho fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i Concentración en partes por millón. y_i absorbancia.

Sustituyendo en las expresiones anteriores con concentración molar para \bar{x} y \bar{y} obtenemos que:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} = \frac{100 + 90 + 80 + 70 + 60 + 50 + 40 + 30 + 20 + 10 + 4.16013}{11} = 50.37819364$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} = \frac{0.8657 + 0.7747 + 0.6896 + 0.6009 + 0.5354 + 0.4244 + 0.3444 + 0.2559 + 0.1724 + 0.1274 + 0.053}{11} = 0.440663636$$

Sustituyendo en las expresiones anteriores para S_{xy} y S_{xx} con concentraciones en ppm obtenemos que:

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)^2}{n} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = (554.16013 - 50.37819364)^2 = 253796.2394$$



$$S_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = (554.16013 - 50.37819364)(4.8473 - 0.440663636) \\ = 2219.9838$$

Sustituyendo en las expresiones once y doce:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{42219.9838}{253796.2394} = 0.008747111$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = 0.440663636 - (0.008747111 * 50.37819364) = 0$$

Para calcular la predicción de y_i se sustituye en la expresión diecisiete obteniendo las siguientes estimaciones:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 100) = 0.87471107$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 90) = 0.787239963$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 80) = 0.699768856$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 70) = 0.612297749$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 60) = 0.524826642$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 50) = 0.437355535$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 40) = 0.349884428$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 30) = 0.262413321$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 20) = 0.174942214$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 10) = 0.087471107$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (0.008747111 * 4.16013) = 0.036389118$$



Sustituyendo en la expresión dieciocho encontramos que:

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.8657 - 0.87471107 = -0.00901107$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.7747 - 0.787239963 = -0.012539963$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6896 - 0.699768856 = -0.010168856$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6044 - 0.612297749 = -0.007897749$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.5354 - 0.524826642 = 0.010573358$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.4244 - 0.437355535 = -0.012955535$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.3444 - 0.349884428 = -0.005484428$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.2559 - 0.262413321 = -0.006513321$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1724 - 0.174942214 = -0.002542214$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1274 - 0.087471107 = 0.039928893$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.053 - 0.036389118 = 0.016610882$$

Una vez obtenido el coeficiente de proporcionalidad molar será este el valor que se empleará para modelar solo la parte que nos interesa de la recta, tomando como base la curva de calibración y la ley de Lambert-Beer.

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = \varepsilon bc = \varepsilon_{\lambda,A} | C_A$$

Despejando y utilizando la absorbancia obtenida de manera experimental obtenemos que:

$$c = \frac{A}{b\varepsilon} = \frac{A}{\varepsilon_{\lambda,A} |} = \frac{0.053}{0.008747111 * 1} = 6.059143624$$



Calculando la disminución de la concentración inicial menos la concentración final:

$$DCr = 100 - 6.059143624 = 93.94085638$$

Al estimar la suma de cuadrados del error se sustituyendo en la expresión diecinueve obtenemos que:

$$SC_E = \sum_{i=1}^n e_i^2 = (2.22045 * 10^{-16})^2 = 4.93038 * 10^{-32}$$

Para calcular el cuadrado medio del error el cual nos servirá para el análisis de varianza sustituimos en la expresión veinte:

$$CM_E = \frac{SC_E}{n - 2} = \frac{4.93038 * 10^{-32}}{11 - 2} = 5.4782 * 10^{-33}$$

Sustituyendo en la expresión veintidós para la suma de cuadrados de la regresión obtenemos que:

$$SC_R = \beta_1 * S_{xy} = 0.008747111 * 2219.9838 = 19.41844404$$

Para analizar la significancia del modelo se realiza la siguiente hipótesis:

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_0: \beta_1 \neq 0$$

Sustituyendo en la expresión veintitrés obtenemos que:

$$F_0 = \frac{SC_R/1}{SC_E/n - 2} = \frac{CM_R}{CM_E} = \frac{19.41844404}{5.4782 * 10^{-33}} = 5.48076 * 10^{33}$$

Comparación del estadístico de prueba con respecto del valor crítico obtenido en tablas con distribución F.



$$H_1: \beta_1 \neq 0 \text{ si } F_0 > F_{(0.05,1,9)}$$

Al desarrollar los cálculos con StatPlus se cambió a la concentración como variable dependiente, tomando el lugar de la variable independiente la absorbancia.

Evaluación del biofiltro en concentración molar que corresponde al segundo tratamiento. A continuación, se muestra una tabla que corresponde a la concentración y absorbancia.

3.1.3 Tabla 9. Datos para la regresión

Concentración en Molaridad x_i	Absorbancia y_i
0.000017	0.8657
0.0000153	0.7747
0.000013576	0.6896
0.000011879	0.6044
0.000010182	0.5354
0.000008485	0.4244
0.000006788	0.3444
0.000005091	0.2559
0.000003394	0.1724
0.000001697	0.1274
1.0314E-06	0.053

Tabla 9. Los datos de la tabla nueve fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i absorbancia. y_i Concentración en molaridad.

Sustituyendo en las expresiones anteriores con concentración molar para \bar{x} y \bar{y} obtenemos que:



$$\begin{aligned}\bar{x} &= \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} = \\ &= \frac{1.70 * 10^{-5} + 1.53 * 10^{-5} + 1.3576 * 10^{-5} + 1.1879 * 10^{-5} + 1.0182 * 10^{-5} + 8.4850 * 10^{-6} + 6.7880 * 10^{-6} + 5.0910 * 10^{-6} + 3.3940 * 10^{-6} + 1.6970 * 10^{-6} + 9.9500 * 10^{-7}}{11} \\ &= 8.57545 * 10^{-6}\end{aligned}$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} = \frac{0.8657 + 0.7747 + 0.6896 + 0.6044 + 0.5354 + 0.4244 + 0.3444 + 0.2559 + 0.1724 + 0.1274 + 0.053}{11} = 0.440663636$$

Sustituyendo en las expresiones anteriores para S_{xy} y S_{xx} con concentraciones en molaridad obtenemos que:

$$\begin{aligned}S_{xx} &= \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n x_i)^2}{n} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = (9.4330 * 10^{-5} - 8.57545 * 10^{-6})^2 \\ &= 7.35384 * 10^{-9}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}S_{xy} &= \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = (9.4330 * 10^{-5} - 8.57545 * 10^{-6})(4.8473 - 0.440663636) \\ &= 3.7789 * 10^{-4}\end{aligned}$$

Sustituyendo en las expresiones once y doce:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{3.7789 * 10^{-4}}{7.35384 * 10^{-9}} = 51386.62144$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = 0.440663636 - (51386.62144 * 8.57545 * 10^{-6}) = 0$$

Para calcular la predicción de y_i se sustituye en la expresión diecisiete obteniendo las siguientes estimaciones:

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 1.6970 * 10^{-5}) = 0.872030966$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 1.5273 * 10^{-5}) = 0.784827869$$



$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 1.3576 * 10^{-5}) = 0.697624773$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 1.1879 * 10^{-5}) = 0.610421676$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 1.0182 * 10^{-5}) = 0.523218579$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 8.4850 * 10^{-6}) = 0.436015483$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 6.7880 * 10^{-6}) = 0.348812386$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 5.0910 * 10^{-6}) = 0.26160929$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 3.3940 * 10^{-6}) = 0.174406193$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 1.6970 * 10^{-6}) = 0.087203097$$

$$\hat{y}_i = \beta_0 + (\beta_1 * x_i) = 0 + (51386.62144 * 9.9500 * 10^{-7}) = 0.051129688$$

Sustituyendo en la expresión dieciocho encontramos que:

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.8657 - 0.872030966 = -0.006330966$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.7747 - 0.784827869 = -0.010127869$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6896 - 0.697624773 = -0.008024773$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.6044 - 0.610421676 = -0.006021676$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.5354 - 0.523218579 = 0.012181421$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.4244 - 0.436015483 = -0.011615483$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.3444 - 0.348812386 = -0.004412386$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.2559 - 0.26160929 = -0.00570929$$



$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1724 - 0.174406193 = -0.002006193$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.1274 - 0.087203097 = 0.040196903$$

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i = 0.053 - 0.051129688 = 0.001870312$$

Una vez obtenido el coeficiente de proporcionalidad molar será este el valor que se empleará para modelar solo la parte que nos interesa de la recta, tomando como base la curva de calibración y la ley de Lambert-Beer.

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = \varepsilon b c = \varepsilon_{\lambda, A} | C_A$$

Despejando y utilizando la absorbancia obtenida de manera experimental obtenemos que:

$$c = \frac{A}{b\varepsilon} = \frac{A}{\varepsilon_{\lambda, A} |} = \frac{0.053}{51386.62144 * 1} = 1.0314 * 10^{-6}$$

Calculando la disminución de la concentración inicial menos la concentración final:

$$DCr = 1.6970 * 10^{-5} - 1.0314 * 10^{-6} = 93.94085638$$

Al estimar la suma de cuadrados del error se sustituyendo en la expresión diecinueve obtenemos que:

$$SC_E = \sum_{i=1}^n e_i^2 = (2.22045 * 10^{-16})^2 = 4.93038 * 10^{-32}$$

Para calcular el cuadrado medio del error el cual nos servirá para el análisis de varianza sustituimos en la expresión veinte:

$$CM_E = \frac{SC_E}{n-2} = \frac{4.93038 * 10^{-32}}{11-2} = 5.4782 * 10^{-33}$$



Sustituyendo en la expresión veintidós para la suma de cuadrados de la regresión obtenemos que:

$$SC_R = \beta_1 * S_{xy} = 0.008747111 * 3.7789 * 10^{-4} = 19.41844404$$

Para analizar la significancia del modelo se realiza la siguiente hipótesis:

$$H_0: \beta_1 = 0$$

$$H_0: \beta_1 \neq 0$$

Sustituyendo en la expresión veintitrés obtenemos que:

$$F_0 = \frac{SC_R/1}{SC_E/n-2} = \frac{CM_R}{CM_E} = \frac{19.41844404}{1.2326 * 10^{-32}} = 1.57541 * 10^{33}$$

Comparación del estadístico de prueba con respecto del valor crítico obtenido en tablas con distribución F.

$$H_1: \beta_1 \neq 0 \text{ si } F_0 > F_{(0.05,1,9)}.$$

Al desarrollar los cálculos con StatPlus se cambió a la concentración como variable dependiente, tomando el lugar de la variable independiente la absorbancia.

Al realizar los cálculos con StatPlus se cambió a la concentración como variable dependiente, tomando el lugar de la variable independiente la absorbancia. Los datos obtenidos para la regresión lineal y el análisis de varianza fueron los siguientes:



3.1.1 **Tabla 10. Datos para la regresión**

Absorbancia (x_i)	Concentración en molaridad. (y_i)	Concentración en ppm (y_i)
0.8657	0.000017	100
0.7747	0.0000153	90
0.6896	0.000013576	80
0.6044	0.000011879	70
0.5354	0.000010182	60
0.4244	0.000008485	50
0.3444	0.000006788	40
0.2559	0.000005091	30
0.1724	0.000003394	20
0.1274	0.000001697	10
0.053	0.000000995	4.16013

Tabla diez. Los datos de la tabla diez fueron obtenidos a partir de la curva de calibración y el resultado obtenido al finalizar el primer tratamiento. x_i absorbancia. y_i Concentración en partes por millón y concentración en molaridad.

Los datos fueron capturados realizando la regresión en StatPlus.



4 Resultados.

A continuación, se muestra la tabla 11 que contiene los resultados obtenidos en la regresión lineal.

4.1.1 Tabla 11. Tabla de regresión lineal con una concentración en ppm.

Tabla de regresión lineal con una concentración en ppm						
x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$	\hat{y}_i	e_i
100	0.8657	10000	0.74943649	86.57	0.870763758	-0.0050638
90	0.7747	8100	0.60016009	69.723	0.783687382	-0.0089874
80	0.6896	6400	0.47554816	55.168	0.696611007	-0.0070110
70	0.6044	4900	0.36529936	42.308	0.609534631	-0.0051346
69.594	0.6009	4843.324836	0.36108081	41.8190346	0.60599933	-0.0050993
60	0.5354	3600	0.28665316	32.124	0.522458255	0.0129417
50	0.4244	2500	0.18011536	21.22	0.435381879	-0.0109819
40	0.3444	1600	0.11861136	13.776	0.348305503	-0.0039055
30	0.2559	900	0.06548481	7.677	0.261229127	-0.0053291
20	0.1724	400	0.02972176	3.448	0.174152752	-0.0017528
10	0.1274	100	0.01623076	1.274	0.087076376	0.0403236
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x^2$	$\sum y^2$	$\sum x_i y_i$	$\sum \hat{y}_i$	$\sum e_i$
619.594	5.3952	43343.32484	3.24834212	375.1070346	5.3952	1.387778 $8 \cdot 10^{(-16)}$
\bar{x}	\bar{y}	S_{xx}	S_{xy}	β_1	β_0	S_{yy}
56.32672 727	0.490472 727	317270.0205	2762.672354	0.00870763 758202952	0	24.0563496

Tabla 11. En la siguiente tabla se describe los resultados obtenidos en la regresión lineal simple donde S_{xx} se representa como la solución de xx . S_{xy} se interpreta como la solución de xy . β_1 es la proporción que disminuye o incrementa con respecto de la variable x . β_0 se interpreta como la interferencia que es eliminada por el blanco. S_{yy} se interpreta como variabilidad total observada en la variable de respuesta.



4.1.1 Tabla 12. Análisis de varianza.

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad.	Cuadrado medio.	F ₀	VALOR-P
Regresión.	24.05634962	1	24.05634962	1.12417 * 10 ³⁴	0
Error o residual.	2.13992 * 10 ⁻³³	9	2.13992 * 10 ⁻³³		
Total.	24.0563496	10			

Tabla 12. Análisis de varianza para el modelo de regresión lineal.

Al desarrollar los cálculos con StatPlus se cambió a la concentración como variable dependiente, tomando el lugar de la variable independiente la absorbancia.

4.1.2 Tabla 13. Resultados de la regresión.

Estadísticos de Regresión	
R	0.99872
R-Cuadrado	0.99745
R-Cuadrado ajustado	0.99717
R2 Cuadrado Pronosticado	0.99544
N	11
$y_i = -1.67948 + 118.26592 * x_i$	

Tabla 13. Muestra los estadísticos de regresión. R² mide la proporción de la variabilidad en los datos de Y que son explicados en la regresión. R-Cuadrado Ajustado mide el ajuste en la variabilidad de Y. N mide los datos totales de la muestra. $y_i = -1.67948 + 118.26592 * x_i$ representa los resultados obtenidos para el polinomio característico en la regresión.

4.1.3 Tabla 14. Análisis de varianza.

ANOVA					
	d.f.	SS	MS	F	Valor p
Regresión	1	8422.08008	8422.08008	3518.56675	0
Residuo	9	21.5425	2.39361		
Total	10	8443.62258			

Tabla 14. Análisis de varianza en la regresión. d. f. Grados de libertad. SS suma de cuadrados. MS cuadrados medios. F mide la distribución F.



4.1.4 **Tabla 15. Residuos.**

Residuos			
Observación	y_i	Y Predicha	Residuo
1	100	100.70333	-0.70333
2	90	89.94113	0.05887
3	80	79.8767	0.1233
4	70	69.80044	0.19956
5	69.594	69.38651	0.20749
6	60	61.64009	-1.64009
7	50	48.51258	1.48742
8	40	39.0513	0.9487
9	30	28.58477	1.41523
10	20	18.70956	1.29044
11	10	13.3876	-3.3876
Mínimo	10	13.3876	-3.3876
Máximo	100	100.70333	1.48742
Media	56.32673	56.32673	0

Tabla 15. Observaciones se refiere al número de muestras. y_i concentración experimental en ppm. Y predicha concentración estimada mediante el modelo de regresión lineal. Residuos error existente entre la concentración experimental y la concentración predicha.

Se muestran los gráficos hechos en Excel y Statplus a partir de los datos obtenidos de forma experimental y teórica.

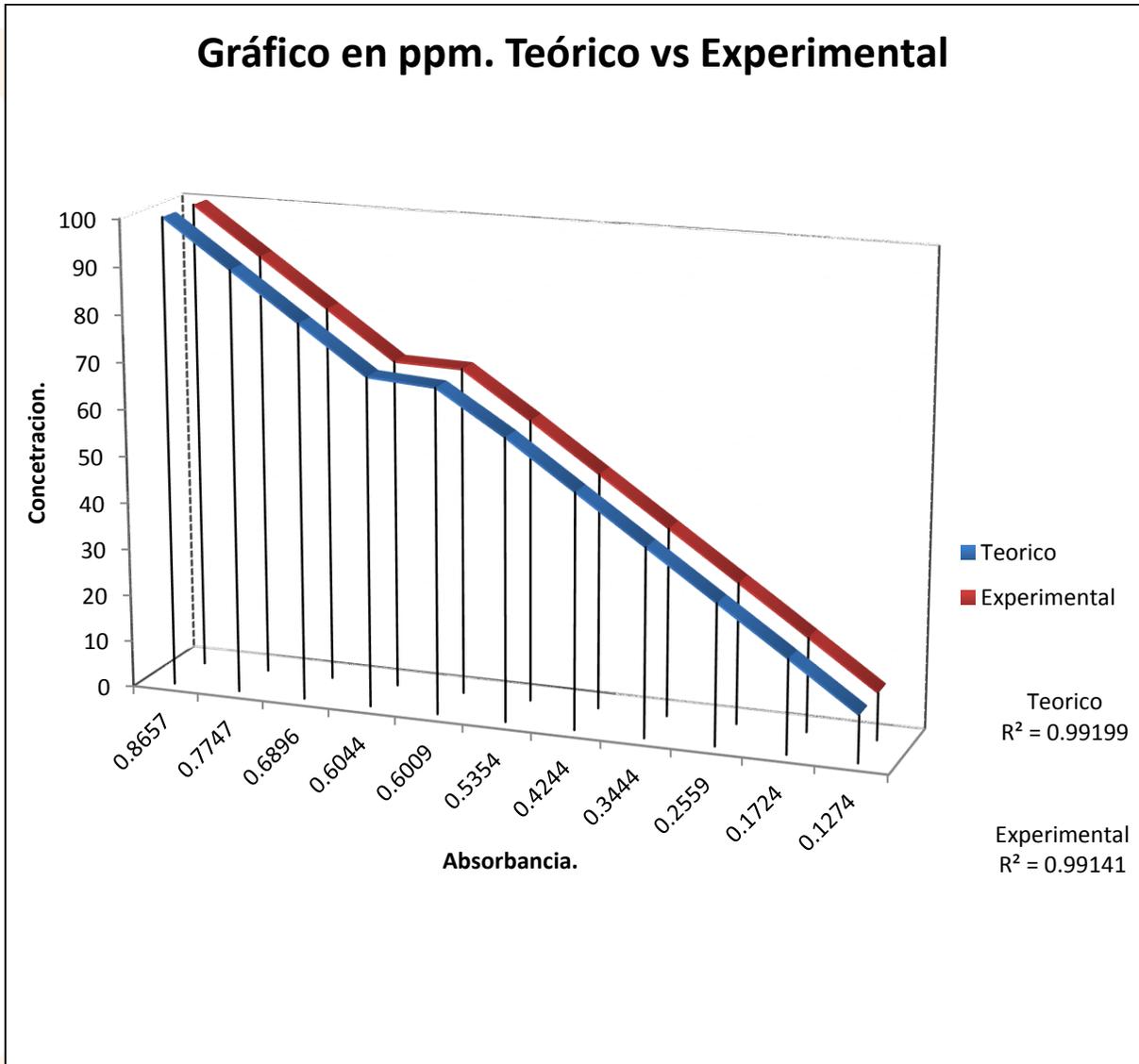


Gráfico 1. Se muestra el comportamiento de la parte experimental (línea roja) con respecto a la parte teórica (línea azul). Al calcular la variabilidad de Y que corresponden a los datos teóricos y experimentales.



Gráfico en ppm. Teórico vs Experimental

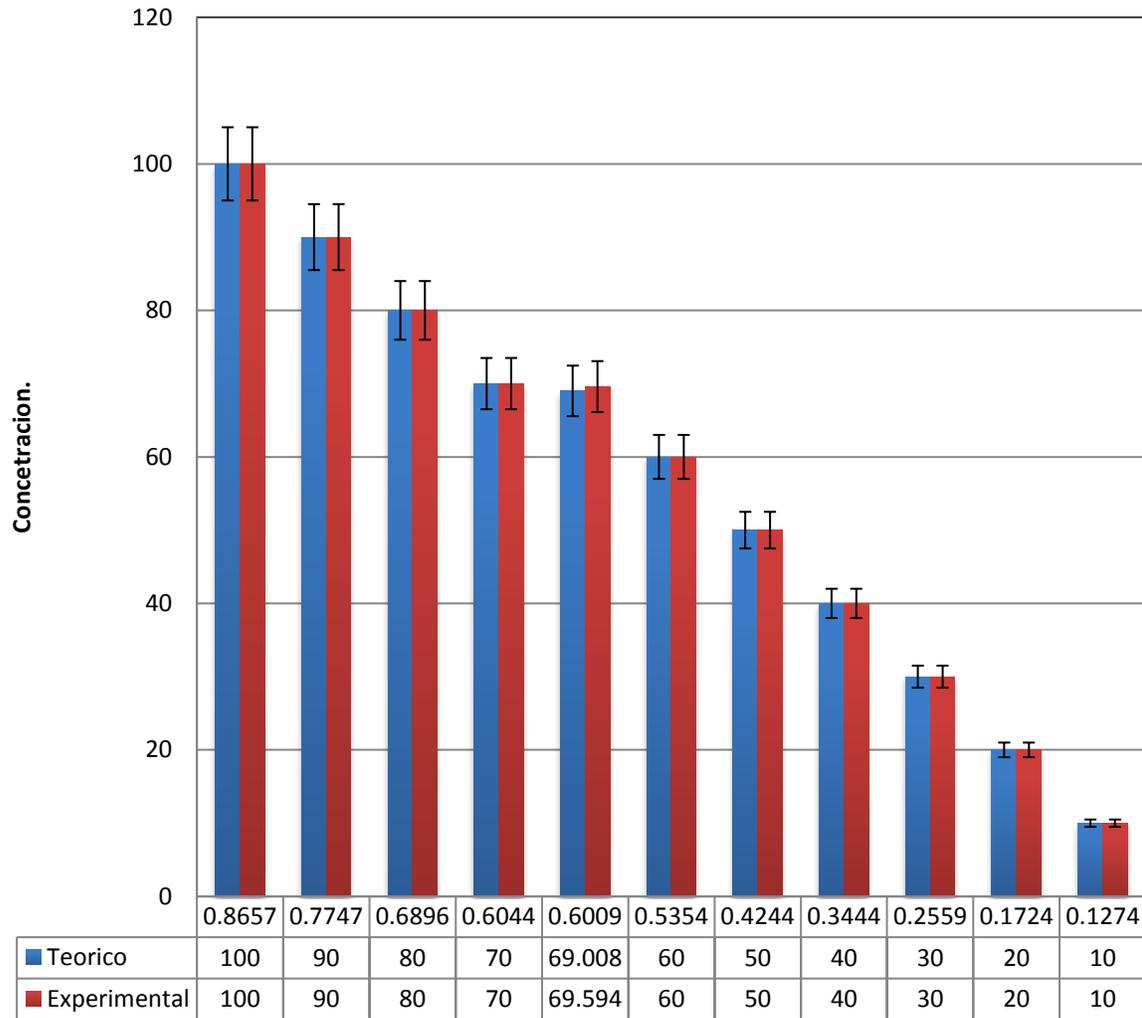


Gráfico 2. Se evaluó un rango de error correspondiente al más menos cinco por ciento comparando la parte teórica y la experimental.

Diagrama de dispersión (Y Predicha, y_i vs. x_i)

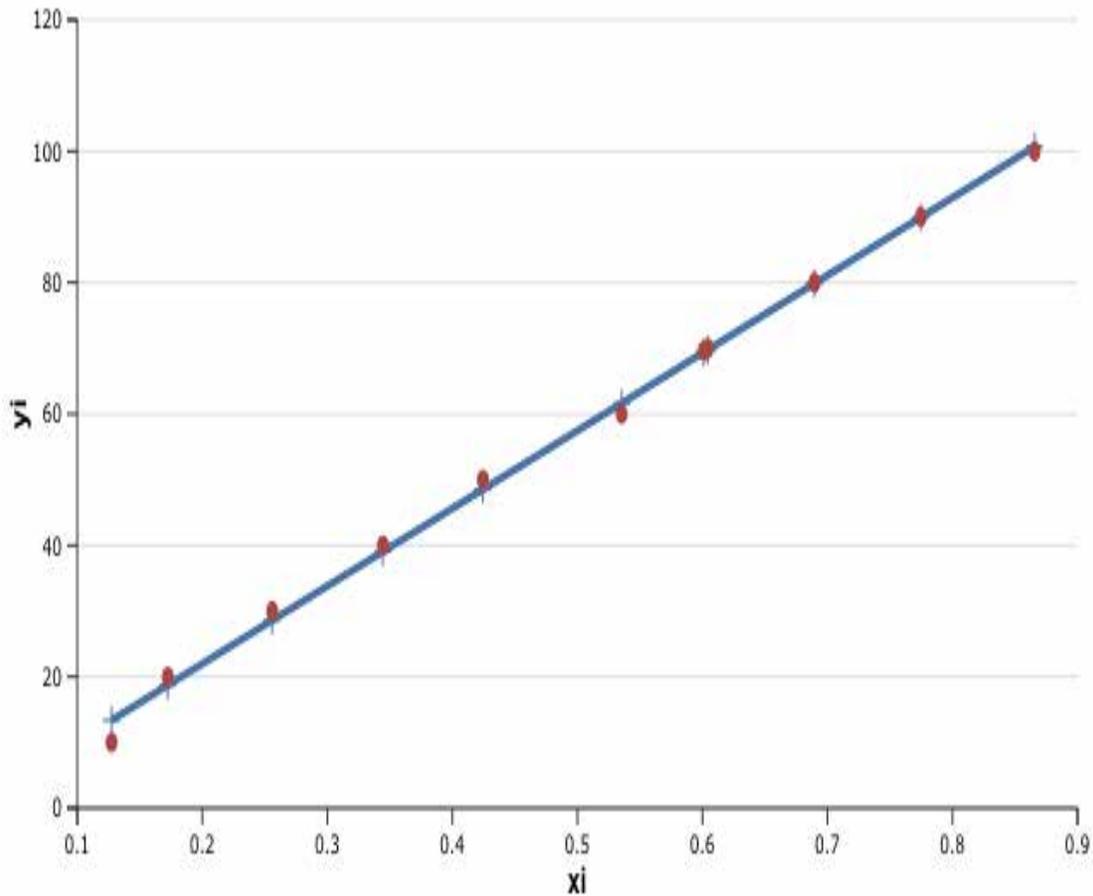


Gráfico 3. Diagrama de dispersión entre la concentración predicha y la concentración experimental contra la absorbancia.

Residuos vs xi

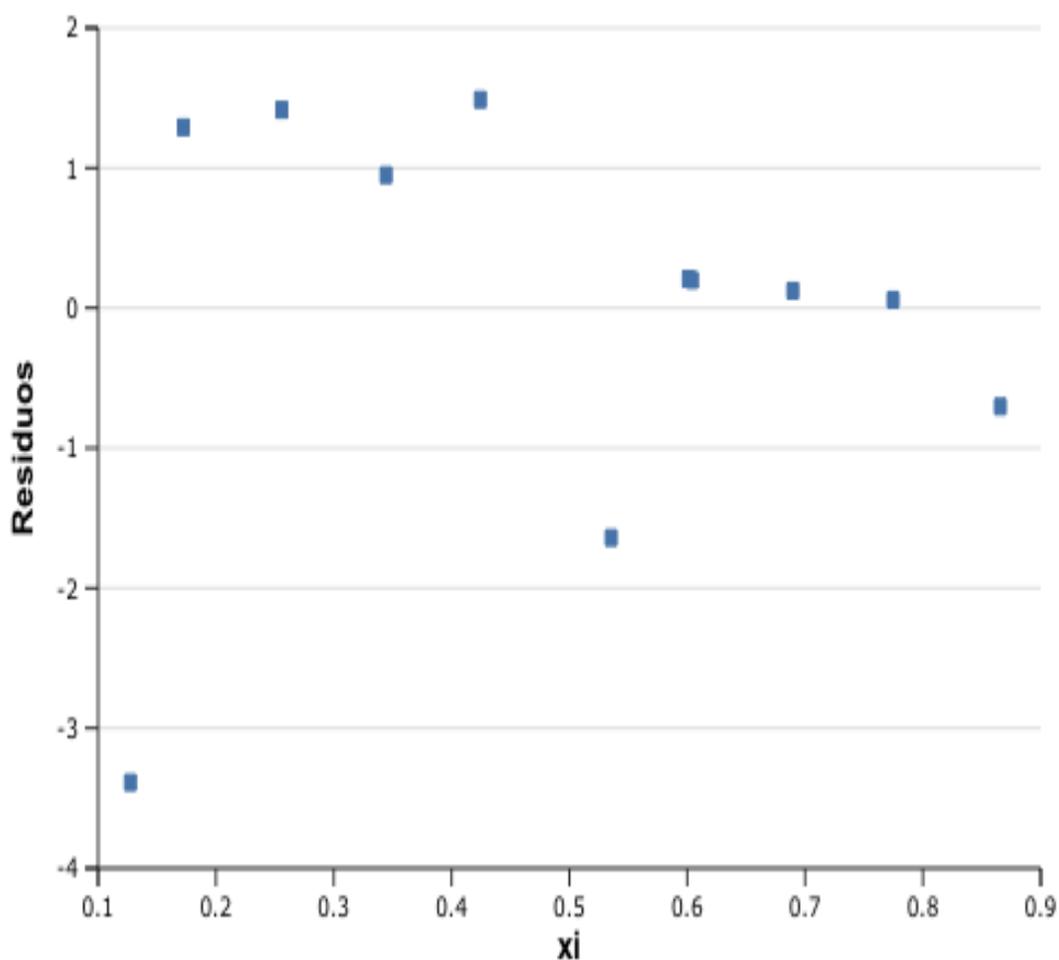


Gráfico 4. Evaluación de los residuos contra xi (absorbancia) obtenidos mediante el software StatPlus.

A continuación, se muestra la tabla 16 que contiene los resultados obtenidos en la regresión lineal.



4.1.5 Tabla 16. Análisis de regresión.

x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$	\hat{y}_i	e_i
1.697000* 10 ⁻⁵	0.8657	2.87981*10 ⁻¹⁰	0.74943649	1.46909*10 ⁻⁵	0.875008783	-0.009308783
1.527300* 10 ⁻⁵	0.7747	2.33265*10 ⁻¹⁰	0.60016009	1.1832*10 ⁻⁵	0.787507905	-0.012807905
1.357600* 10 ⁻⁵	0.6896	1.84308*10 ⁻¹⁰	0.47554816	9.36201*10 ⁻⁶	0.700007026	-0.010407026
1.187900* 10 ⁻⁵	0.6044	1.41111*10 ⁻¹⁰	0.36529936	7.17967*10 ⁻⁶	0.612506148	-0.008106148
1.130000* 10 ⁻⁵	0.6009	1.2769*10 ⁻¹⁰	0.36108081	6.79017*10 ⁻⁶	0.582651694	0.018248306
1.018200* 10 ⁻⁵	0.5354	1.03673*10 ⁻¹⁰	0.28665316	5.45144*10 ⁻⁶	0.52500527	0.01039473
8.485000* 10 ⁻⁶	0.4244	7.19952*10 ⁻¹¹	0.18011536	3.60103*10 ⁻⁶	0.437504391	-0.013104391
6.788000* 10 ⁻⁶	0.3444	4.60769*10 ⁻¹¹	0.11861136	2.33779*10 ⁻⁶	0.350003513	-0.005603513
5.091000* 10 ⁻⁶	0.2559	2.59183*10 ⁻¹¹	0.06548481	1.30279*10 ⁻⁶	0.262502635	-0.006602635
3.394000* 10 ⁻⁶	0.1724	1.15192*10 ⁻¹¹	0.02972176	5.85126*10 ⁻⁷	0.175001757	-0.002601757
1.697000* 10 ⁻⁶	0.1274	2.87981*10 ⁻¹²	0.01623076	2.16198*10 ⁻⁷	0.087500878	0.039899122
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x^2$	$\sum y^2$	$\sum x_i y_i$	$\sum \hat{y}_i$	$\sum e_i$
1.04635*1 0 ⁻⁴	5.3952	1.23642*10 ⁻⁹	3.24834212	6.33491*10 ⁻⁵	5.3952	1.387778 8*10 ⁽⁻¹⁶⁾
\bar{x}	\bar{y}	S_{xx}	S_{xy}	β_1	β_0	S_{yy}
9.51227*1 0 ⁻⁶	0.490472 727	9.04833*10 ⁻⁹	4.66551 *10 ⁻⁴	51562.09681	0	24.0563496



En la tabla 16 se describen los resultados obtenidos en la regresión lineal simple donde S_{xy} se interpreta como la solución de xy . β_1 es la proporción que disminuye o incrementa con respecto de la variable x . β_0 se interpreta como la interferencia que es eliminada por el blanco. S_{yy} se interpreta como variabilidad total observada en la variable de respuesta.

4.1.6 Tabla 17. Análisis de varianza.

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad.	Cuadrado medio.	F ₀	VALOR-P
Regresión.	24.05634962	1	24.05634962	1.12417 * 10 ³⁴	0.000
Error o residual.	2.13992 * 10 ⁻³³	9	2.13992 * 10 ⁻³³		
Total.	24.0563496	10			

Tabla 17. Análisis de varianza para el modelo de regresión lineal.

Al desarrollar los cálculos con StatPlus se cambió a la concentración como variable dependiente, tomando el lugar de la variable independiente la absorbancia.

Los datos obtenidos para la regresión lineal y el análisis de varianza fueron los siguientes:

4.1.7 Tabla 18. Estadísticos de la regresión.

Estadísticos de Regresión	
R	0.99831
R-Cuadrado	0.99662
R-Cuadrado Ajustado	0.99624
N	11
$y_i \text{ mol} = -2.85498\text{E-}7 + 0.00002 * x_i$	

Tabla 18. Muestra los estadísticos de regresión. R^2 mide la proporción de la variabilidad en los datos de Y que son explicados en la regresión. R-Cuadrado Ajustado mide el ajuste en la variabilidad de Y . N mide los datos totales de la muestra. $y_i = -2.85498 * 10^{-7} + 0.00002 * x_i$ representa los resultados obtenidos para el polinomio característico en la regresión.



4.1.8 Tabla 19. Análisis de varianza.

ANOVA					
	d.f.	SS	MS	F	Valor p
Regresión	1	2.40E-10	2.40E-10	2,651.04	1.97E-12
Residuo	9	0	0		
Total	10	2.41E-10			

Tabla 19. Análisis de varianza en la regresión. d. f. Grados de libertad. SS suma de cuadrados. MS cuadrados medios. F mide la distribución F.

4.1.9 Tabla 20. Residuos.

Residuos			
Observación	y_i mol	Y Predicha	Residuo
1	0.00002	0.00002	$-3.79 \cdot 10^{-8}$
2	0.00002	0.00002	$8.30 \cdot 10^{-8}$
3	0.00001	0.00001	$8.59 \cdot 10^{-8}$
4	0.00001	0.00001	$9.09 \cdot 10^{-8}$
5	0.00001	0.00001	$-4.18 \cdot 10^{-7}$
6	0.00001	0.00001	$-2.28 \cdot 10^{-7}$
7	$8.49 \cdot 10^{-6}$	8.19E-06	$2.93 \cdot 10^{-7}$
8	$6.79 \cdot 10^{-6}$	6.59E-06	$1.94 \cdot 10^{-7}$
9	$5.09 \cdot 10^{-6}$	4.83E-06	$2.65 \cdot 10^{-7}$
10	$3.39 \cdot 10^{-6}$	3.16E-06	$2.36 \cdot 10^{-7}$
11	$1.70 \cdot 10^{-6}$	2.26E-06	$-5.62 \cdot 10^{-7}$

En la tabla 20 las observaciones se refieren al número de muestras en el tratamiento. y_i concentración experimental molar. Y predicha concentración estimada mediante el modelo de regresión lineal. Residuos error existente entre la concentración experimental y la concentración predicha.

A continuación, se muestran los datos para realizar las gráficas el comportamiento de la recta y el porcentaje de error que existe entre la parte teórica y experimental, tomando como base la curva de la calibración obtenida de forma experimental.

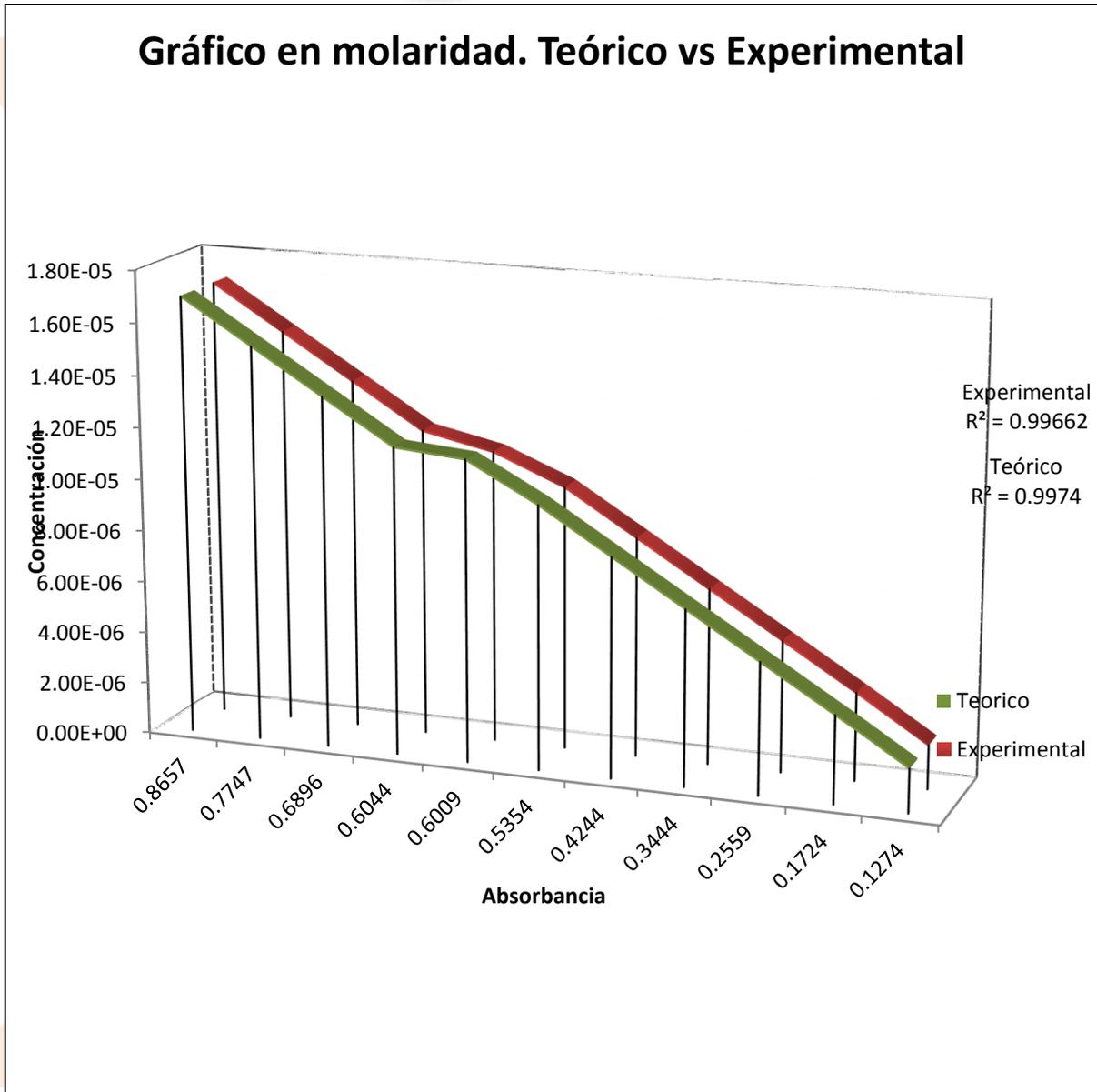


Gráfico 5. Se muestra el comportamiento de la parte experimental (línea roja) con respecto a la parte teórica (línea azul). Al calcular la variabilidad de Y que corresponden a los datos teóricos y experimentales.



Gráfico en ppm. Teórico vs Experimental

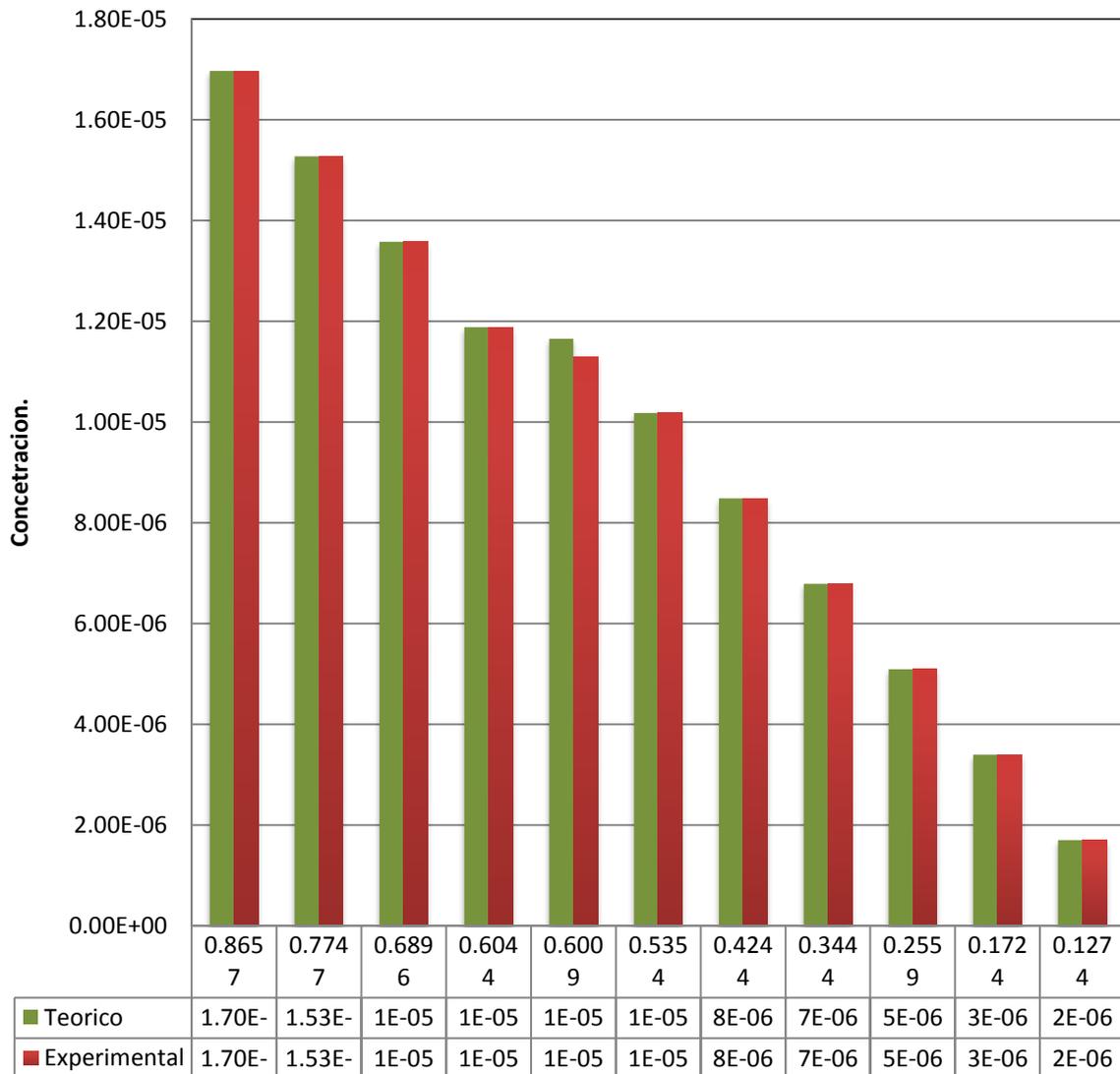


Gráfico 6. Se evaluó un rango de error correspondiente al más menos cinco por ciento comparando la parte teórica y experimental.



Diagrama de dispersión (Y Predicha, y_i mol vs. x_i)

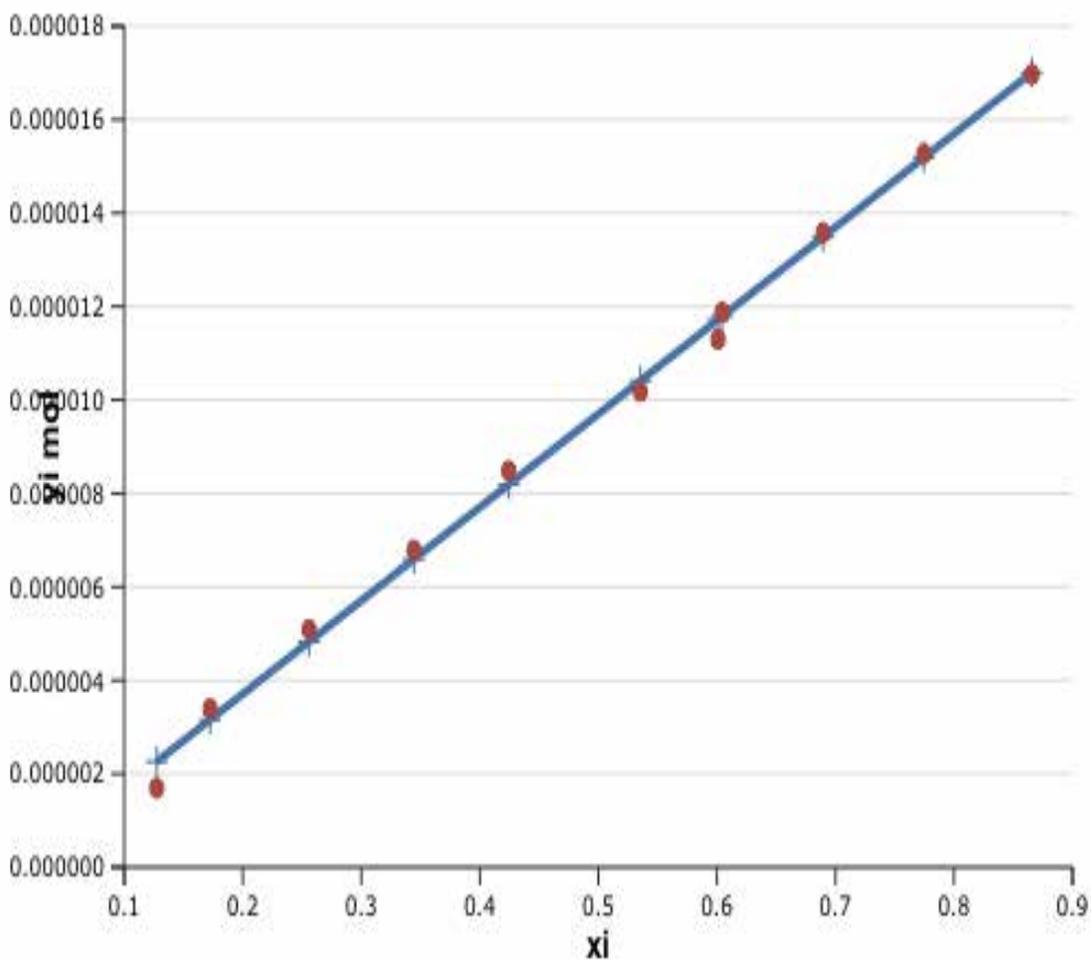


Gráfico 7. Diagrama de dispersión entre la concentración predicha y la concentración experimental contra la absorbancia

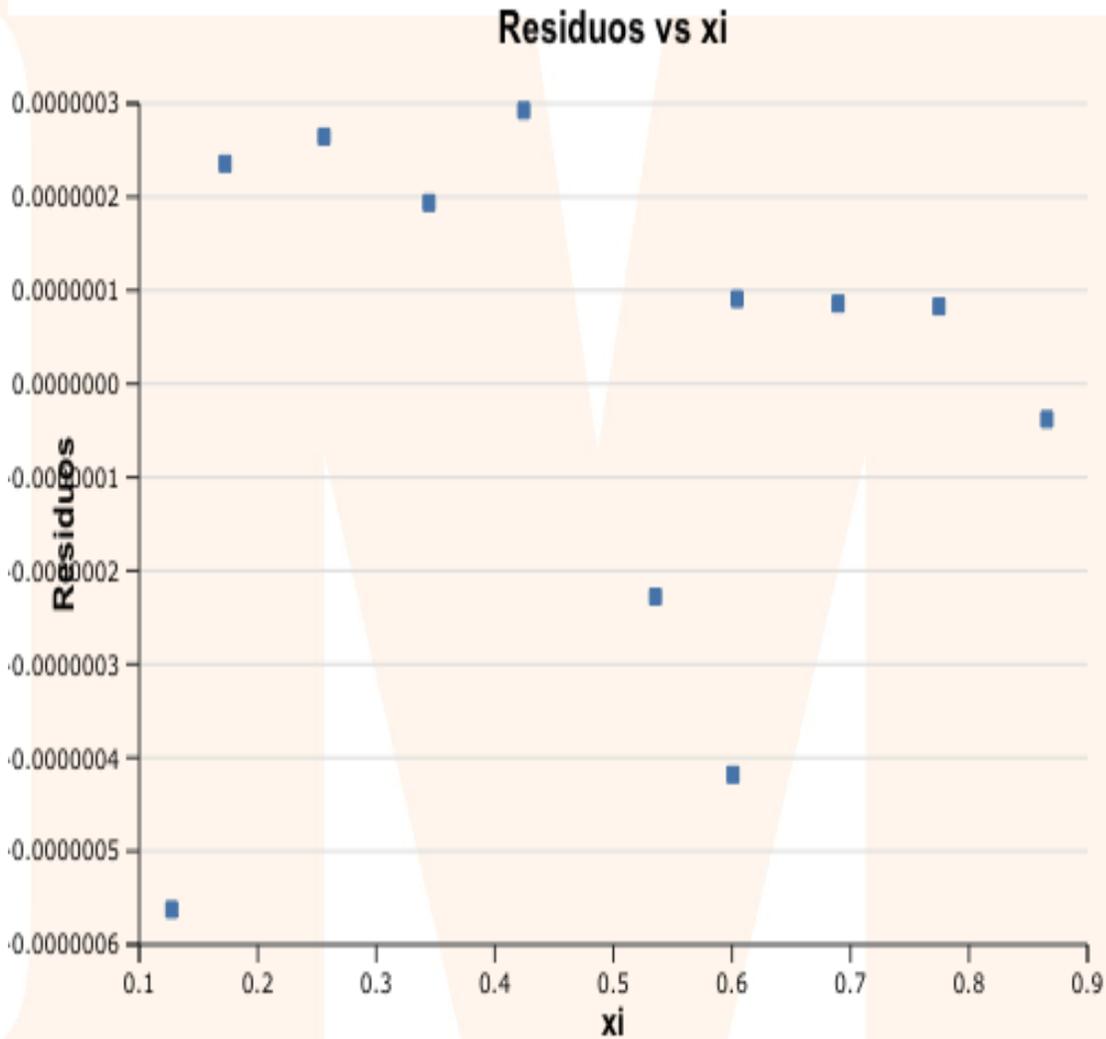


Gráfico 8. Evaluación de los residuos contra xi (absorbancia) obtenidos mediante el software StatPlus.



A continuación, se muestra la tabla 21 que contiene los resultados obtenidos en la regresión lineal.

4.1.10 Tabla 21. Regresión lineal

Tabla de regresión lineal con una concentración en ppm						
x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$	\hat{y}_i	e_i
100	0.8657	10000	0.74943649	86.57	0.873528888	-0.007828888
90	0.7747	8100	0.60016009	69.723	0.786175999	-0.011475999
80	0.6896	6400	0.47554816	55.168	0.69882311	-0.00922311
70	0.6044	4900	0.36529936	42.308	0.611470221	-0.007070221
60	0.5354	3600	0.28665316	32.124	0.524117333	0.011282667
53.75793				25.7876828		
799	0.4797	2889.915897	0.23011209	5	0.469591118	0.010108882
50	0.4244	2500	0.18011536	21.22	0.436764444	-0.012364444
40	0.3444	1600	0.11861136	13.776	0.349411555	-0.005011555
30	0.2559	900	0.06548481	7.677	0.262058666	-0.006158666
20	0.1724	400	0.02972176	3.448	0.174705778	-0.002305778
10	0.1274	100	0.01623076	1.274	0.087352889	0.040047111
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x^2$	$\sum y^2$	$\sum x_i y_i$	$\sum \hat{y}_i$	$\sum e_i$
603.7579	5.274	41389.9159	3.1173734	359.075682	5.274	-1.94289
38	5.274	41389.9159	3.1173734	9		$*10^{(-16)}$
\bar{x}	\bar{y}	S_{xx}	S_{xy}	β_1	β_0	S_{yy}
54.88708	0.479454	301259.213	2631.586252	0.00873528	0	22.98766612
527	545			9	0	

Tabla 21. En la presente tabla se describe los resultados obtenidos en la regresión lineal simple donde S_{xx} se representa como la solución de xx . S_{xy} se interpreta como la solución de xy . β_1 es la proporción que disminuye o incrementa con respecto de la variable x . β_0 se interpreta como la interferencia que es eliminada por el blanco. S_{yy} se interpreta como variabilidad total observada en la variable de respuesta.



4.1.11 Tabla 22. Análisis de varianza.

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad.	Cuadrado medio.	F ₀	VALOR-P
Regresión.	22.98766612	1	22.98766612	5.48076*10 ³³	0
Error o residual.	3.77482*10 ⁻³²	9			
Total.	22.98766612	10	4.19425*10 ⁻³³		

Tabla 22. Análisis de varianza para el modelo de regresión lineal.

Los datos obtenidos para la regresión lineal y el análisis de varianza fueron los siguientes:

4.1.12 Tabla 23. Estadísticos de la regresión

Estadísticos de Regresión	
R	0.99861
R-Cuadrado	0.99722
R-Cuadrado Ajustado	0.99691
N	11
$y_i = - 1.79527 + 118.22258 * x_i$	

Tabla 23. Muestra los estadísticos de regresión. R² mide la proporción de la variabilidad en los datos de Y que son explicados en la regresión. R-Cuadrado Ajustado mide el ajuste en la variabilidad de Y. N mide los datos totales de la muestra. $y_i = - 1.79527 + 118.22258 * x_i$ representa el resultado para el polinomio característico en la ecuación.



4.1.13 Tabla 24. Análisis de varianza.

ANOVA					
	d.f.	SS	MS	F	Valor p
Regresión	1	8,228.43	8,228.43	3,224.09	0
Residuo	9	22.96955	2.55217		
Total	10	8,251.40			

Tabla 24. Análisis de varianza en la regresión. d. f. Grados de libertad. SS suma de cuadrados. MS cuadrados medios. F mide la distribución F.

4.1.14 Tabla 25. Residuos.

Residuos			
Observación	yi	Y Predicha	Residuo
1	100	100.55002	-0.55002
2	90	89.79176	0.20824
3	80	79.73102	0.26898
4	70	69.65846	0.34154
5	60	61.5011	-1.5011
6	53.75794	54.9161	-1.15817
7	50	48.37839	1.62161
8	40	38.92059	1.07941
9	30	28.45789	1.54211
10	20	18.5863	1.4137
11	10	13.26629	-3.26629

Tabla 25. Observaciones se refiere al número de muestras en el tratamiento. yi concentración experimental molar. Y predicha concentración estimada mediante el modelo de regresión lineal. Residuos error existente entre la concentración experimental y la concentración predicha.

Se muestran los gráficos hechos en Excel y Statplus a partir de los datos obtenidos de forma experimental y teórica.

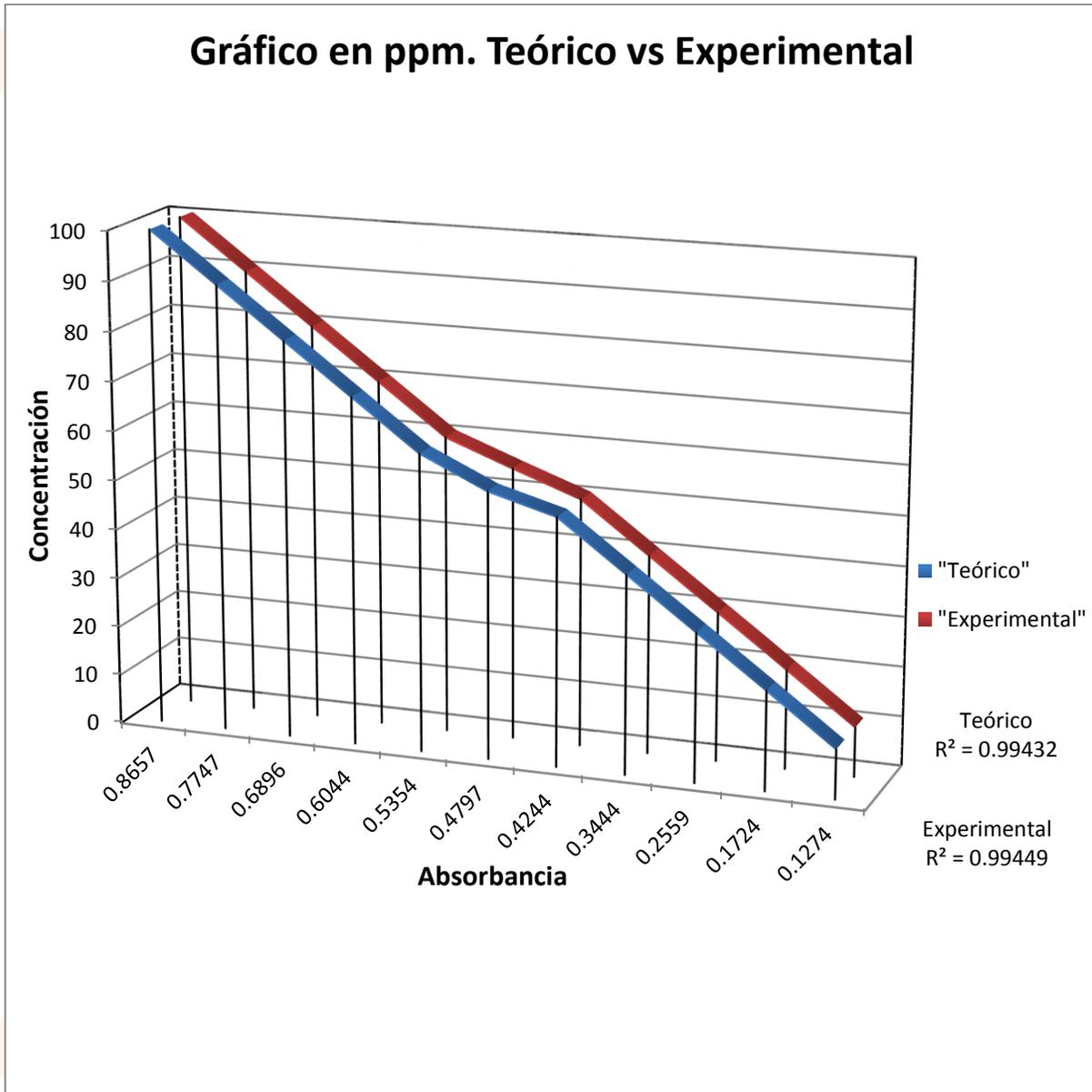


Gráfico 9. Se muestra el comportamiento de la parte experimental (línea roja) con respecto a la parte teórica (línea azul). Al calcular la variabilidad de Y que corresponden a los datos teóricos y experimentales.

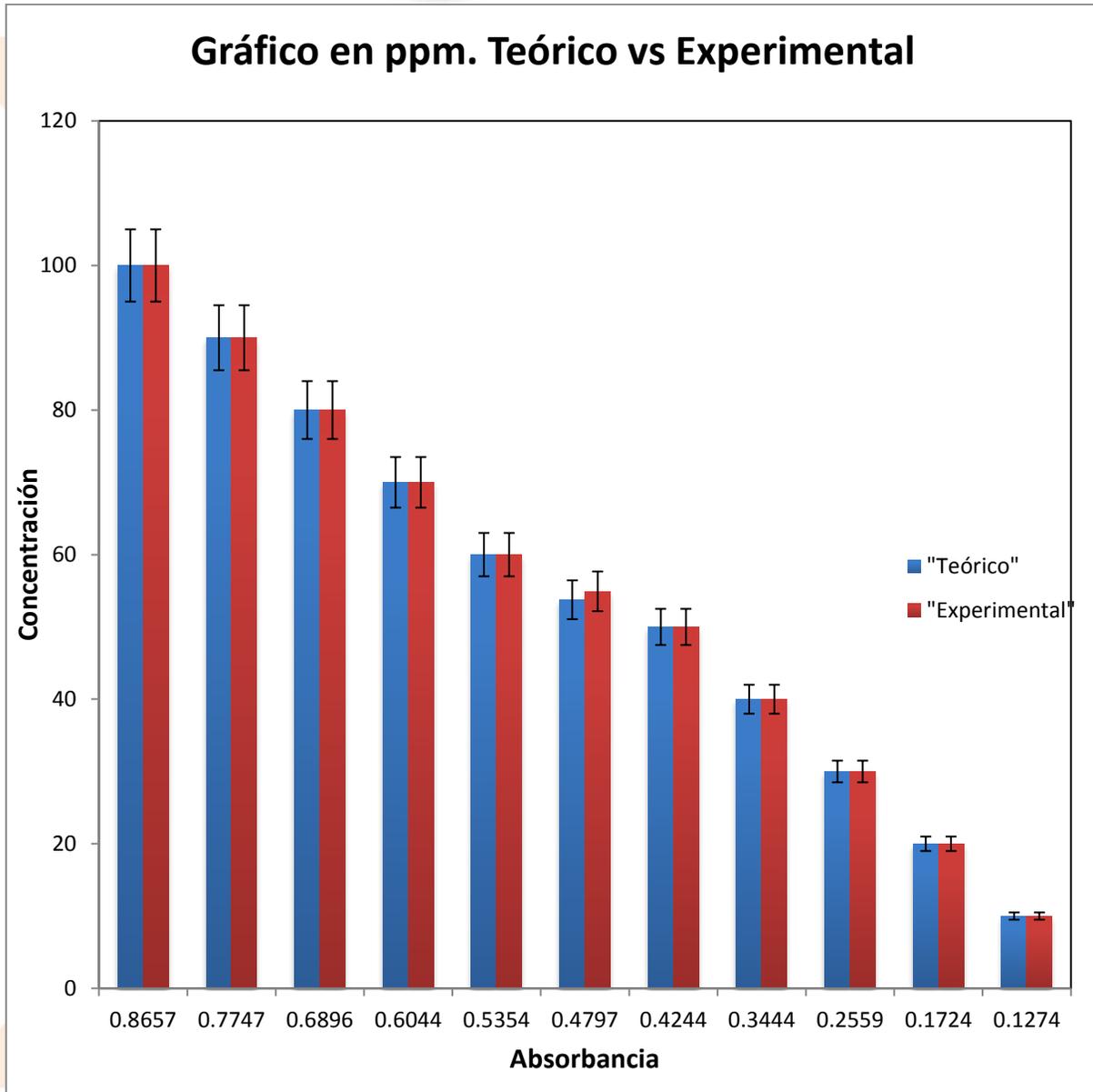


Gráfico 10. Se evaluó un rango de error correspondiente al más menos cinco por ciento comparando la parte teórica y experimental.

Diagrama de dispersión (Y Predicha, y_i vs. x_i)

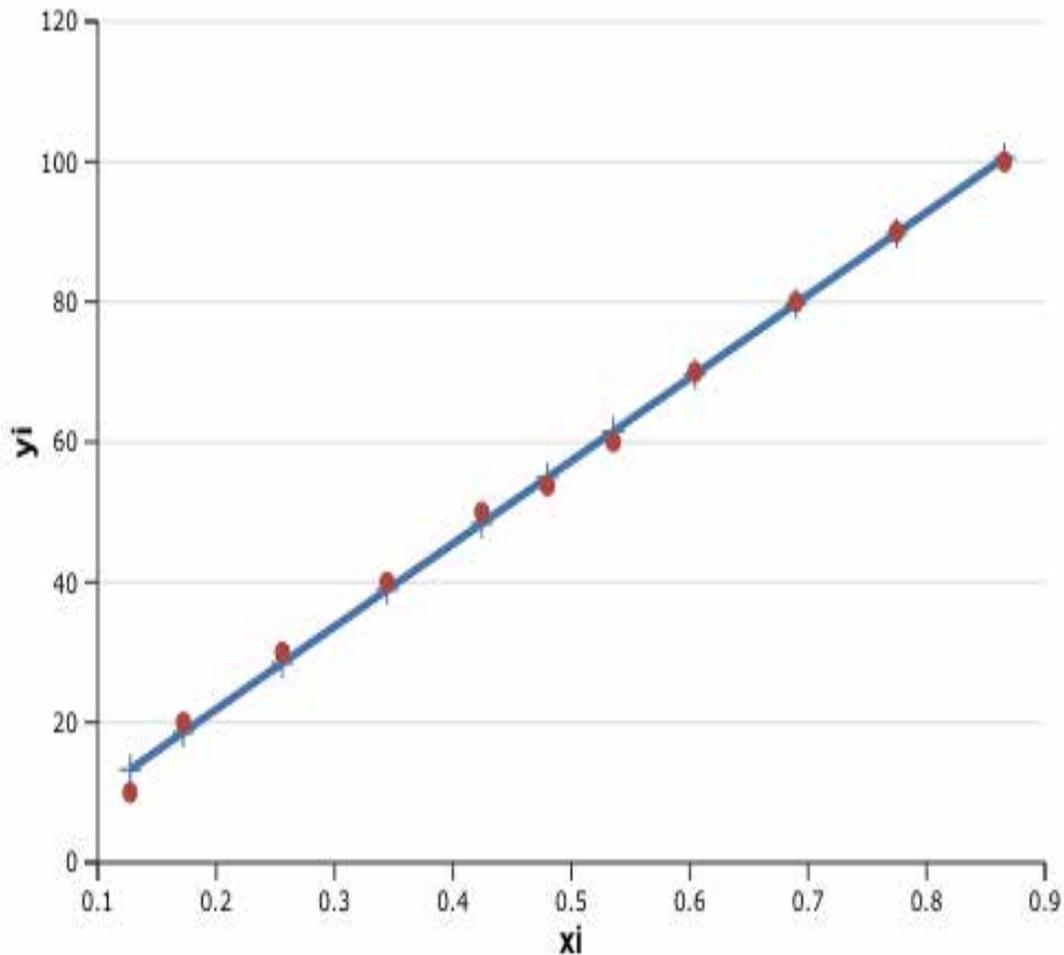


Gráfico 11. Diagrama de dispersión entre la concentración predicha y la concentración experimental contra la absorbancia.

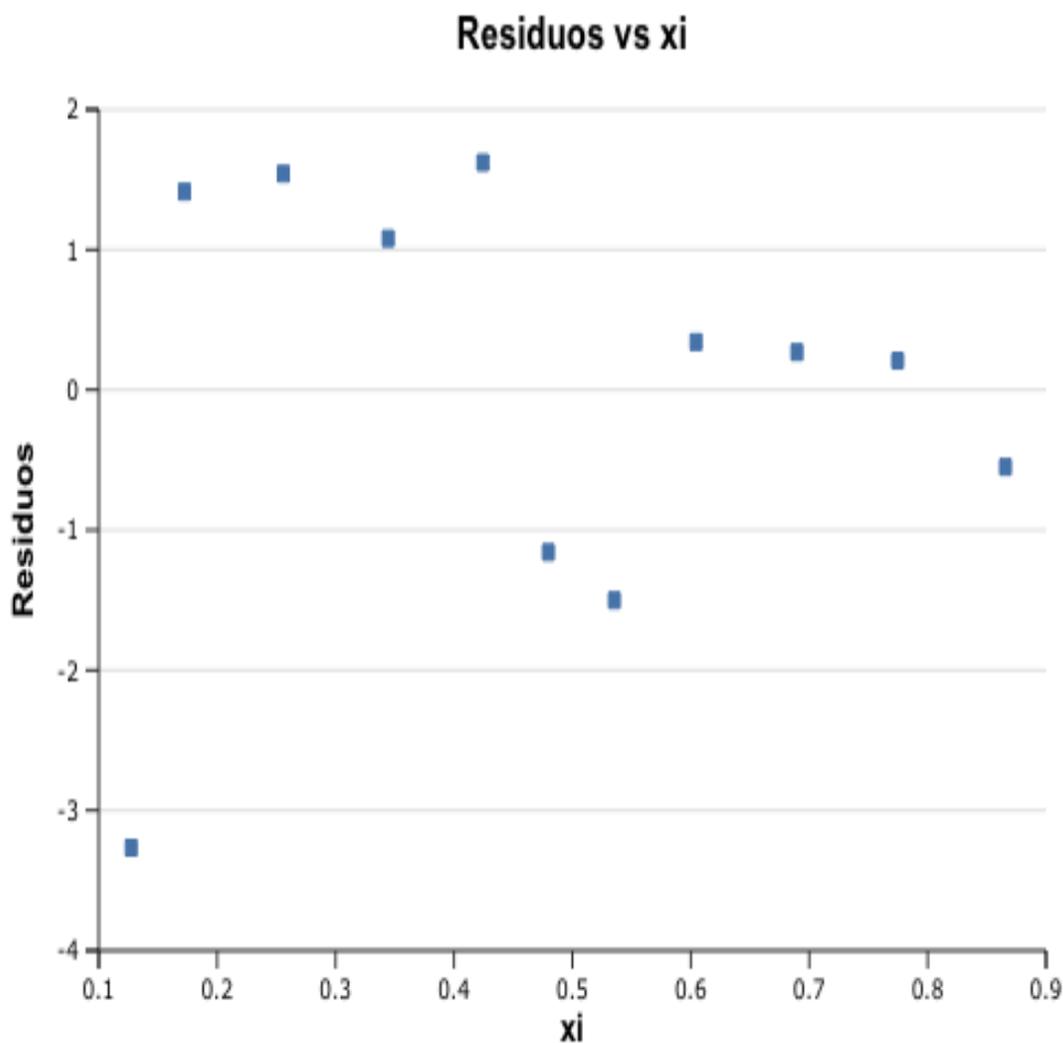


Gráfico 12. Evaluación de los residuos contra xi (absorbancia) obtenidos mediante el software StatPlus.



A continuación, se muestra la tabla 26 que contiene los resultados obtenidos en la regresión lineal.

4.1.15 Tabla 26. Regresión lineal.

Tabla de regresión lineal con una concentración en molar.						
x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$	\hat{y}_i	e_i
$1.697 \cdot 10^{-5}$	0.8657	$2.87981 \cdot 10^{-10}$	0.74943649	$1.46909 \cdot 10^{-5}$	0.87457644	-0.00887644
$1.5273 \cdot 10^{-5}$	0.7747	$2.33265 \cdot 10^{-10}$	0.60016009	1.183210^{-5}	0.787118796	-0.012418796
$1.3576 \cdot 10^{-5}$	0.6896	$1.84308 \cdot 10^{-10}$	0.47554816	$9.36201 \cdot 10^{-6}$	0.699661152	-0.010061152
$1.1879 \cdot 10^{-5}$	0.6044	$1.41111 \cdot 10^{-10}$	0.36529936	$7.17967 \cdot 10^{-6}$	0.612203508	-0.007803508
$1.0182 \cdot 10^{-5}$	0.5354	$1.03673 \cdot 10^{-10}$	0.28665316	$5.45144 \cdot 10^{-6}$	0.524745864	0.010654136
$9.00 \cdot 10^{-6}$	0.4797	$8.1 \cdot 10^{-11}$	0.23011209	$4.3173 \cdot 10^{-6}$	0.463829579	0.015870421
$8.485 \cdot 10^{-6}$	0.4244	$7.19952 \cdot 10^{-11}$	0.18011536	$3.60103 \cdot 10^{-6}$	0.43728822	-0.01288822
$6.788 \cdot 10^{-6}$	0.3444	$4.60769 \cdot 10^{-11}$	0.11861136	$2.33779 \cdot 10^{-6}$	0.349830576	-0.005430576
$5.091 \cdot 10^{-6}$	0.2559	$2.59183 \cdot 10^{-11}$	0.06548481	$1.30279 \cdot 10^{-6}$	0.262372932	-0.006472932
$3.394 \cdot 10^{-6}$	0.1724	$1.15192 \cdot 10^{-11}$	0.02972176	$5.85126 \cdot 10^{-7}$	0.174915288	-0.002515288
$1.697 \cdot 10^{-6}$	0.1274	$2.87981 \cdot 10^{-12}$	0.01623076	$2.16198 \cdot 10^{-7}$	0.087457644	0.039942356
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x^2$	$\sum y^2$	$\sum x_i y_i$	$\sum \hat{y}_i$	$\sum e_i$
$1.02 \cdot 10^{-4}$	5.274	$1.18973 \cdot 10^{-9}$	3.1173734	$6.08763 \cdot 10^{-5}$	5.274	$-5.27356 \cdot 10^{-16}$
\bar{x}	\bar{y}	S_{xx}	S_{xy}	β_1	β_0	S_{yy}
$9.30318 \cdot 10^{-6}$	0.479454 545	$8.65492 \cdot 10^{-9}$	$4.4605 \cdot 10^{-4}$	51536.61992	0	22.98766612

Tabla 26. Se describe los resultados obtenidos en la regresión lineal simple donde S_{xy} se interpreta como la solución de xy . β_1 es la proporción que disminuye o incrementa con respecto de la variable x . β_0 se interpreta como la interferencia que es eliminada por el blanco. S_{yy} se interpreta como variabilidad total observada en la variable de respuesta.



4.1.16 Tabla 27. Análisis de varianza

FUENTE DE V	SUM DE C	GRDOS DE L	CUDRDO M	F0	VALOR-P
SCR	22.98766612	1	22.98766612	7.43926*10 ³²	0.000
SCE	2.78104E-31	9	3.09005*10 ⁻³²		
SYY	22.98766612	10			

Tabla 27. Análisis de varianza para el modelo de regresión lineal.

Los datos obtenidos para la regresión lineal y el análisis de varianza fueron los siguientes:

4.1.17 Tabla 28. Estadísticos de regresión.

Estadísticos de Regresión	
R	0.99848
R-Cuadrado	0.99696
R-Cuadrado Ajustado	0.99662
N	11
$y_i \text{ mol} = - 3.15789 * 10^{-7} + 0.00002 * x_i$	

Tabla 28. Muestra los estadísticos de regresión. R² mide la proporción de la variabilidad en los datos de Y que son explicados en la regresión. R-Cuadrado Ajustado mide el ajuste en la variabilidad de Y. N mide los datos totales de la muestra. $y_i = - 3.15789 * 10^{-7} + 0.00002 * x_i$ representa los resultados obtenidos para el polinomio característico en la regresión.

4.1.18 Tabla 29. Análisis de varianza.

ANOVA					
	d.f.	SS	MS	F	Valor p
Regresión	1	2.37*10 ⁻¹⁰	2.37*10 ⁻¹⁰	2,948.06	1.23*10 ⁻¹²
Residuo	9	0	0		
Total	10	2.38*10 ⁻¹⁰			



Tabla 29. Análisis de varianza en la regresión. d. f. Grados de libertad. SS suma de cuadrados. MS cuadrados medios. F mide la distribución F.

4.1.19 Tabla 30.

Residuos			
Observación	yi mol	Y Predicha	Residuo
1	0.00002	0.00002	-8.22*10 ⁻⁸
2	0.00002	0.00002	4.65*10 ⁻⁸
3	0.00001	0.00001	5.68*10 ⁻⁸
4	0.00001	0.00001	6.91*10 ⁻⁸
5	0.00001	0.00001	-2.44*10 ⁻⁷
6	9.00*10 ⁻⁶	9.31*10 ⁻⁶	-3.08*10 ⁻⁷
7	8.49*10 ⁻⁶	8.20*10 ⁻⁶	2.86*10 ⁻⁷
8	6.79*10 ⁻⁶	6.59*10 ⁻⁶	1.94*10 ⁻⁷
9	5.09*10 ⁻⁶	4.82*10 ⁻⁶	2.73*10 ⁻⁷
10	3.39*10 ⁻⁶	3.14*10 ⁻⁶	2.51*10 ⁻⁷
11	1.70*10 ⁻⁶	2.24*10 ⁻⁶	-5.43*10 ⁻⁷

Tabla 30. Observaciones se refiere al número de muestras en el tratamiento. yi concentración experimental molar. Y predicha concentración estimada mediante el modelo de regresión lineal. Residuos error existente entre la concentración experimental y la concentración predicha.

A continuación, se muestran las gráficos hechos en Excel y Statplus a partir de los datos obtenidos de forma experimental y teórica.

Gráfico en molaridad. Teórico vs Experimental

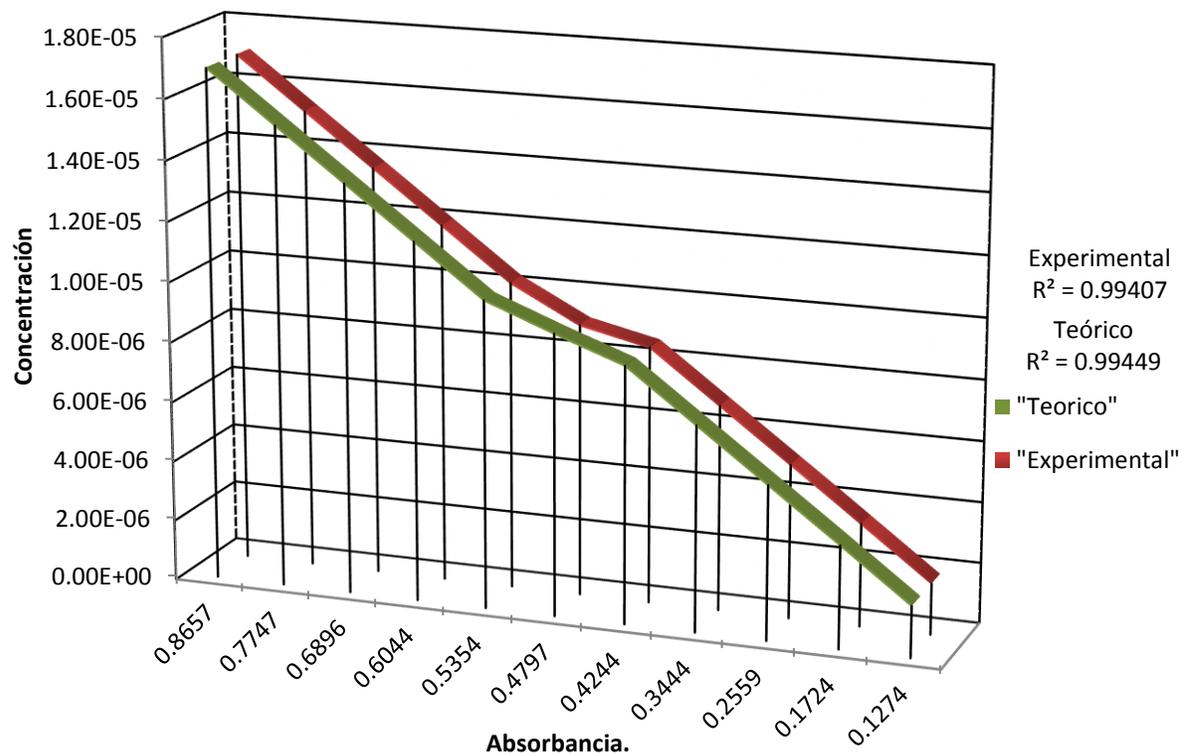


Gráfico13. Se muestra el comportamiento de la parte experimental (línea roja) con respecto a la parte teórica (línea azul). Al calcular la variabilidad de Y que corresponden a los datos teóricos y experimentales.

Gráfico en molaridad. Teórico vs Experimental

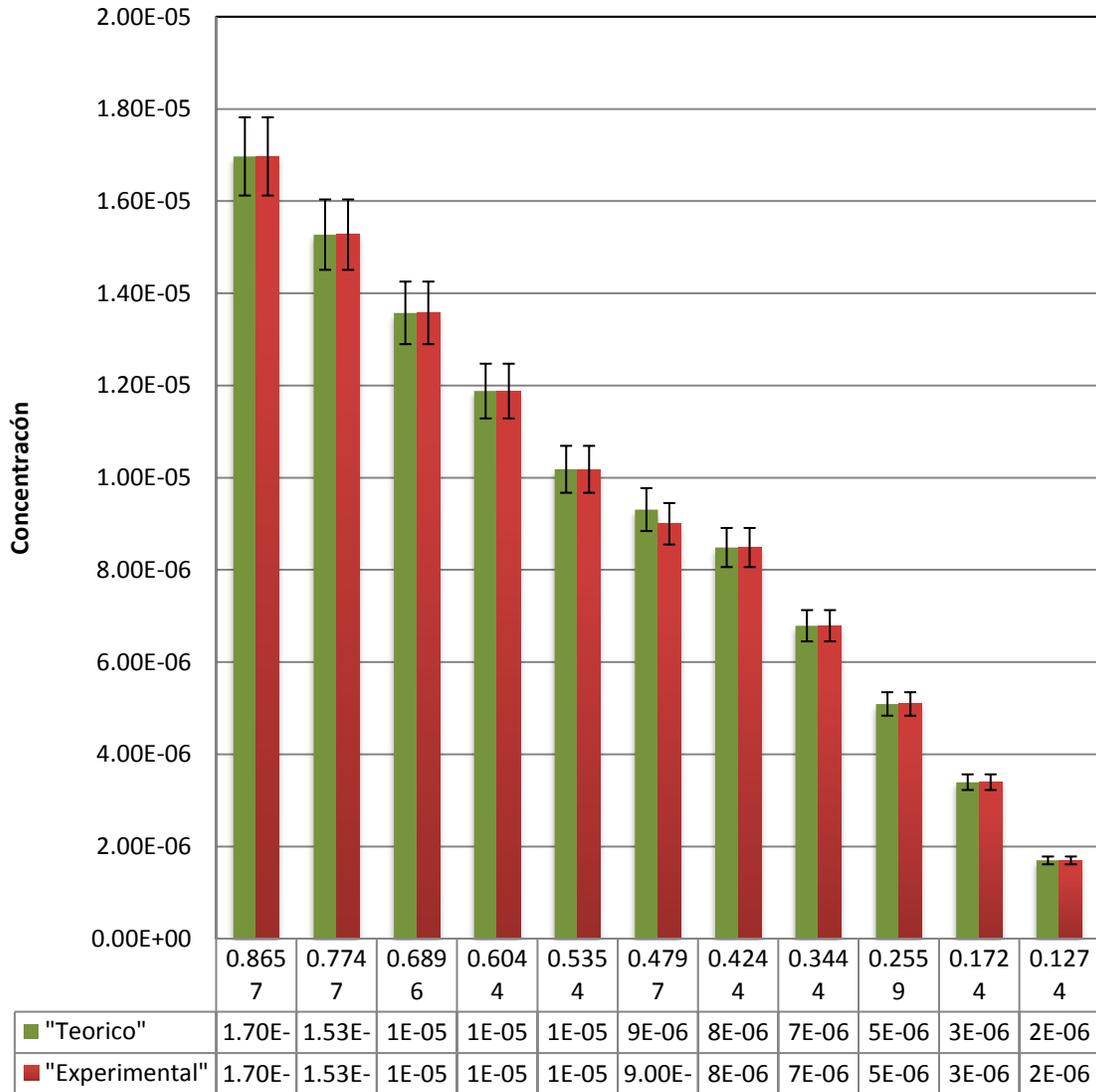


Gráfico 14. Se evaluó un rango de error entre ambas concentraciones el cual corresponde al más menos cinco por ciento comparando la parte teórica y experimental.



Diagrama de dispersión (Y Predicha, y_i mol vs. x_i)

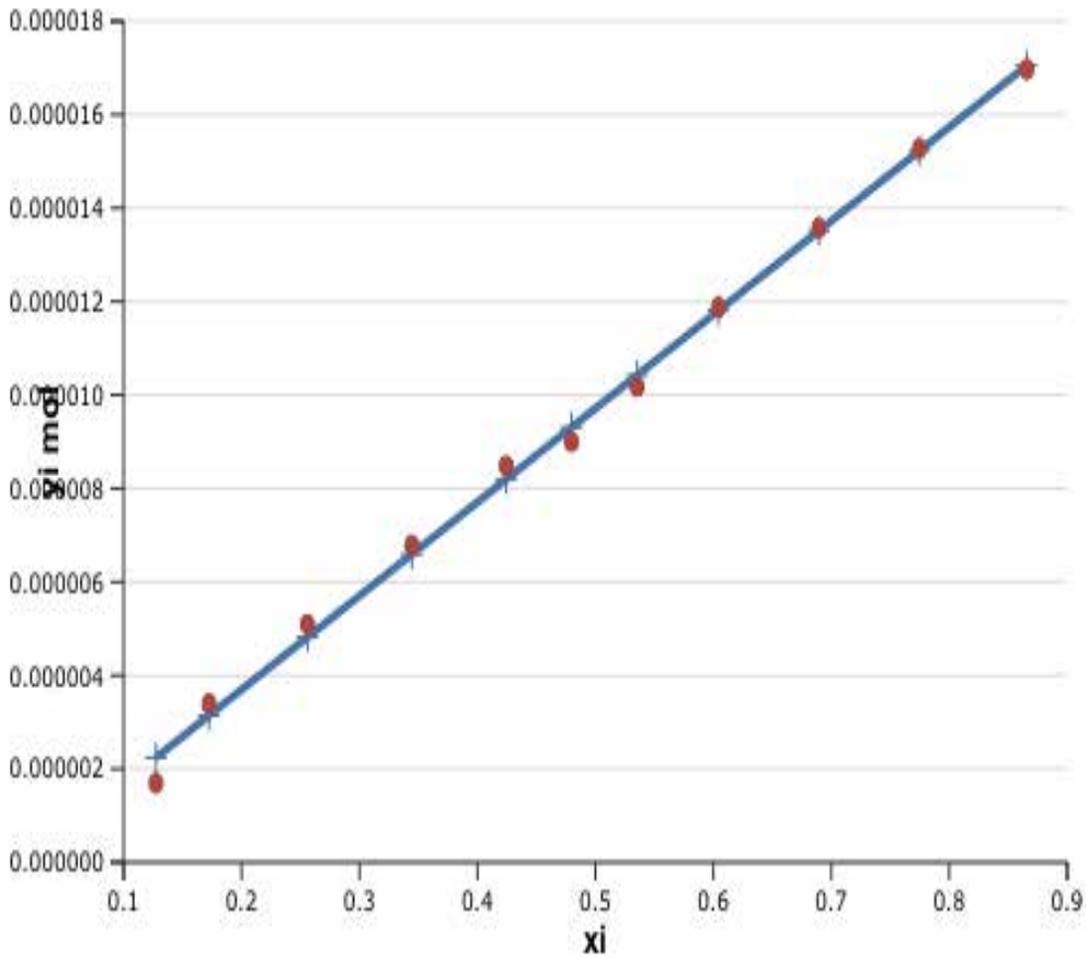


Gráfico 15. Diagrama de dispersión entre la concentración predicha y la concentración experimental contra la absorbancia.

Residuos vs xi

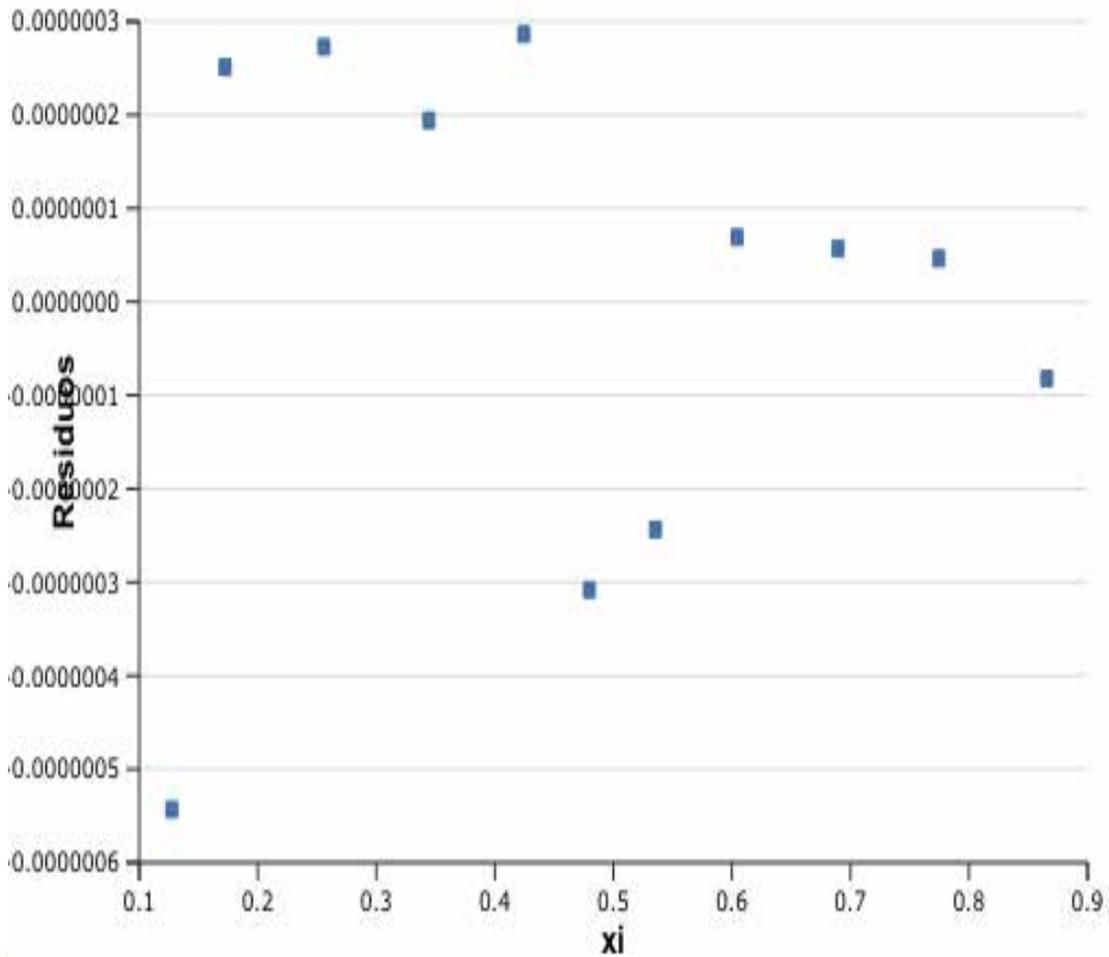


Gráfico 16. Evaluación de los residuos contra xi (absorbancia) obtenidos mediante el software StatPlus.



A continuación, se muestra la tabla 31 que contiene los resultados obtenidos en la regresión lineal.

4.1.20 Tabla 31. Tabla de regresión.

Tabla de regresión lineal con una concentración en ppm						
x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$	\hat{y}_i	e_i
100	0.8657	10000	0.74943649	86.57	0.87471107	-0.00901107
90	0.7747	8100	0.60016009	69.723	0.787239963	-0.012539963
80	0.6896	6400	0.47554816	55.168	0.699768856	-0.010168856
70	0.6044	4900	0.36529936	42.308	0.612297749	-0.007897749
60	0.5354	3600	0.28665316	32.124	0.524826642	0.010573358
50	0.4244	2500	0.18011536	21.22	0.437355535	-0.012955535
40	0.3444	1600	0.11861136	13.776	0.349884428	-0.005484428
30	0.2559	900	0.06548481	7.677	0.262413321	-0.006513321
20	0.1724	400	0.02972176	3.448	0.174942214	-0.002542214
10	0.1274	100	0.01623076	1.274	0.087471107	0.039928893
4.16013	0.053	17.30668162	0.002809	0.2204868	0.036389118	0.016610882
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x^2$	$\sum y^2$	$\sum x_i y_i$	$\sum \hat{y}_i$	$\sum e_i$
554.16013	4.8473	38517.30668	2.89007031	333.508486	4.8473	$2.22045 \cdot 10^{-16}$
\bar{x}	\bar{y}	S_{xx}	S_{xy}	β_1	β_0	S_{yy}
50.378193	0.440663	253796.2394	2219.9838	0.00874711	0	19.41844404
64	636			1	0	

Tabla 31. En la siguiente tabla se describe los resultados obtenidos en la regresión lineal simple donde S_{yy} se interpreta como variabilidad total observada en la variable de respuesta.



4.1.21 Tabla 32. Análisis de varianza

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad.	Cuadrado medio.	F ₀	VALOR-P
Regresión.	19.41844404	1	19.41844404	5.48076*10 ³³	0.000
Error o residual.	4.93038*10 ⁻³²	9			
Total.	19.41844404		5.4782*10 ⁻³³		

Tabla treinta y dos. Análisis de varianza para el modelo de regresión lineal.

Los datos obtenidos para la regresión lineal y el análisis de varianza fueron los siguientes:

4.1.22 Tabla 33. Estadísticos de regresión

Estadísticos de Regresión	
R	0.99898
R-Cuadrado	0.99796
R-Cuadrado Ajustado	0.99773
N	11
$y_i = -1.81494 + 118.44212 * x_i$	

Tabla 33. Muestra los estadísticos de regresión. R² mide la proporción de la variabilidad en los datos de Y que son explicados en la regresión. R-Cuadrado Ajustado mide el ajuste en la variabilidad de Y. N mide los datos totales de la muestra. $y_i = -1.79527 + 118.22258 * x_i$ representa los resultados obtenidos para el polinomio característico en la regresión.



4.1.23 Tabla 34. Análisis de varianza

ANOVA					
	d.f.	SS	MS	F	Valor p
Regresión	1	10,578.10	10,578.10	4,402.88	0
Residuo	9	21.62287	2.40254		
Total	10	10,599.72			

Tabla 34. Análisis de varianza en la regresión. d. f. Grados de libertad. SS suma de cuadrados. MS cuadrados medios. F mide la distribución F.

4.1.24 Tabla 35. Residuos.

Residuos.			
Observación	yi	Y Predicha	Residuo
1	100	100.7204	-0.7204
2	90	89.94217	0.05783
3	80	79.86274	0.13726
4	70	69.77148	0.22852
5	60	61.59897	-1.59897
6	50	48.45189	1.54811
7	40	38.97652	1.02348
8	30	28.4944	1.5056
9	20	18.60448	1.39552
10	10	13.27458	-3.27458
11	4.16013	4.46249	-0.30236

Tabla 35. Observaciones se refiere al número de muestras en el tratamiento. yi concentración experimental molar. Y predicha concentración estimada mediante el modelo de regresión lineal. Residuos error existente entre la concentración experimental y la concentración predicha.

A continuación, se muestran las gráficos hechos en Excel y Statplus a partir de los datos obtenidos de forma experimental y teórica.

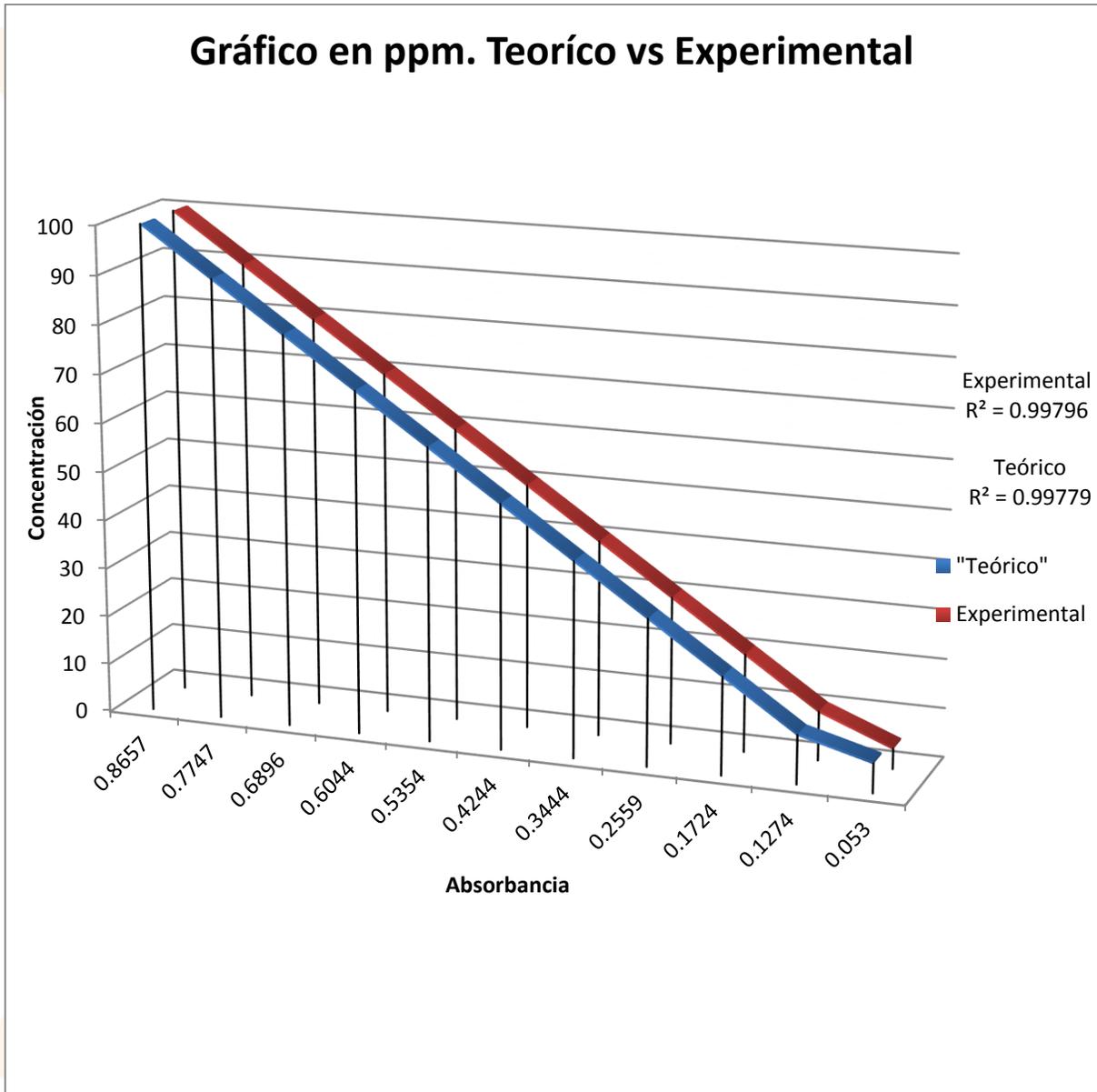


Gráfico 17. Se muestra el comportamiento de la parte experimental (línea roja) con respecto a la parte teórica (línea azul). Al calcular la variabilidad de Y que corresponden a los datos teóricos y experimentales.

Gráfico en ppm. Teórico vs Experimental

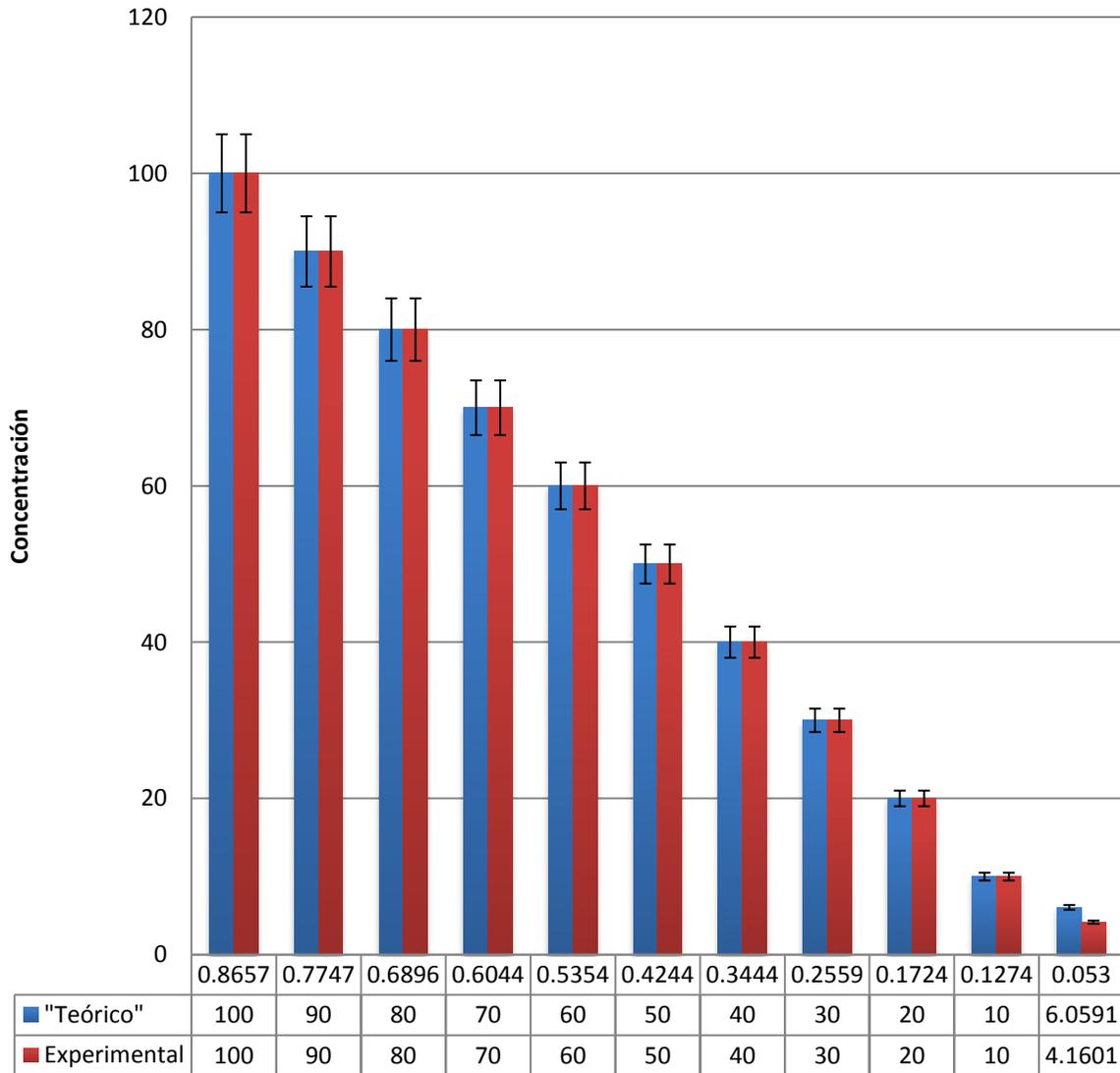


Gráfico 18. Se evaluó un rango de error entre ambas concentraciones el cual corresponde al más menos cinco por ciento comparando la parte teórica y experimental.

Diagrama de dispersión (Y Predicha, y_i vs. x_i)

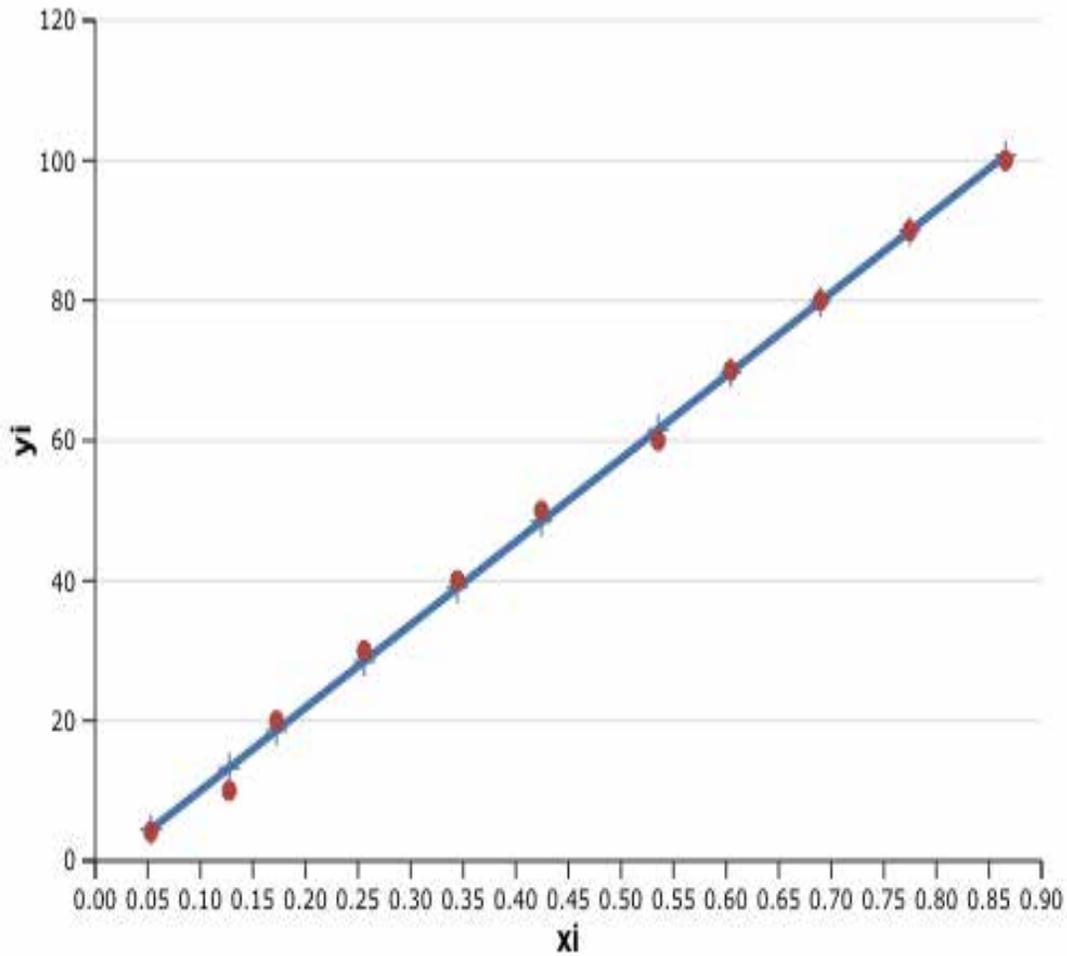


Gráfico 19. Diagrama de dispersión entre la concentración predicha y la concentración experimental contra la absorbancia.



Residuos vs xi

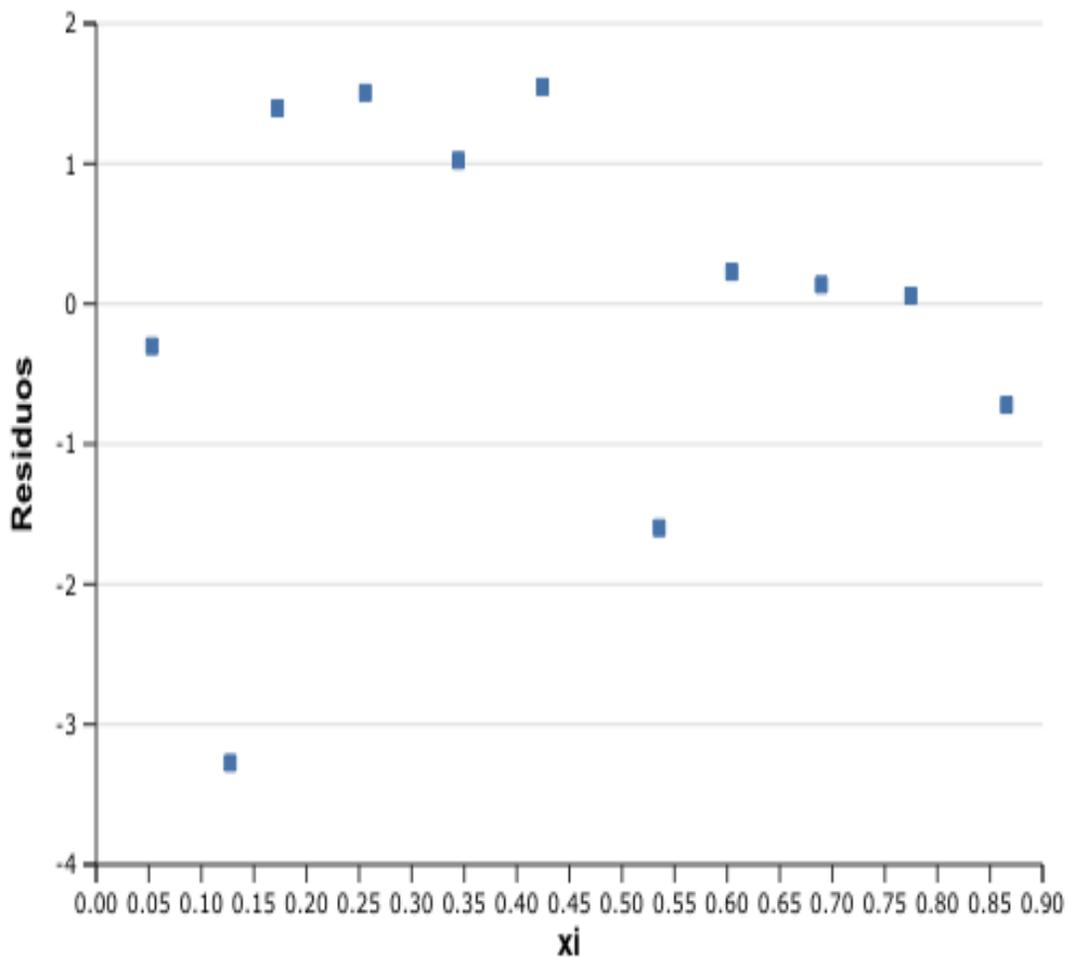
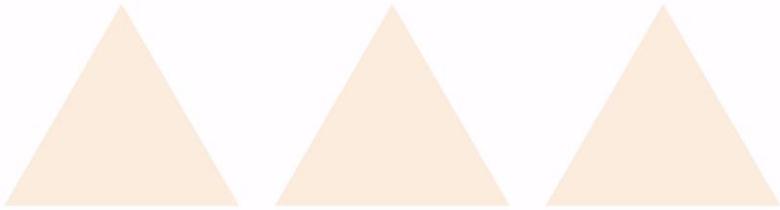


Gráfico 20. Evaluación de los residuos contra xi (absorbancia) obtenidos mediante el software StatPlus.





A continuación, se muestra la tabla 33 que contiene los resultados obtenidos en la regresión lineal.

4.1.25 Tabla 33. Regresión lineal.

Tabla de regresión lineal con una concentración en molar.						
x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$	\hat{y}_i	e_i
$1.6970 \cdot 10^{-5}$	0.8657	$2.87981 \cdot 10^{-10}$	0.74943649	$1.46909 \cdot 10^{-5}$	0.872030966	-0.006330966
$1.5273 \cdot 10^{-5}$	0.7747	$2.33265 \cdot 10^{-10}$	0.60016009	$1.1832 \cdot 10^{-5}$	0.784827869	-0.010127869
$1.3576 \cdot 10^{-5}$	0.6896	$1.84308 \cdot 10^{-10}$	0.47554816	$9.36201 \cdot 10^{-6}$	0.697624773	-0.008024773
$1.1879 \cdot 10^{-5}$	0.6044	$1.41111 \cdot 10^{-10}$	0.36529936	$7.17967 \cdot 10^{-6}$	0.610421676	-0.006021676
$1.0182 \cdot 10^{-5}$	0.5354	$1.03673 \cdot 10^{-10}$	0.28665316	$5.45144 \cdot 10^{-6}$	0.523218579	0.012181421
$8.4850 \cdot 10^{-6}$	0.4244	$7.19952 \cdot 10^{-11}$	0.18011536	$3.60103 \cdot 10^{-6}$	0.436015483	-0.011615483
$6.7880 \cdot 10^{-6}$	0.3444	$4.60769 \cdot 10^{-11}$	0.11861136	$2.33779 \cdot 10^{-6}$	0.348812386	-0.004412386
$5.0910 \cdot 10^{-6}$	0.2559	$2.59183 \cdot 10^{-11}$	0.06548481	$1.30279 \cdot 10^{-6}$	0.26160929	-0.00570929
$3.3940 \cdot 10^{-6}$	0.1724	$1.15192 \cdot 10^{-11}$	0.02972176	$5.85126 \cdot 10^{-7}$	0.174406193	-0.002006193
$1.6970 \cdot 10^{-6}$	0.1274	$2.87981 \cdot 10^{-12}$	0.01623076	$2.16198 \cdot 10^{-7}$	0.087203097	0.040196903
$9.9500 \cdot 10^{-7}$	0.053	$9.90025 \cdot 10^{-13}$	0.002809	$5.2735 \cdot 10^{-8}$	0.051129688	0.001870312
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x^2$	$\sum y^2$	$\sum x_i y_i$	$\sum \hat{y}_i$	$\sum e_i$
$9.4330 \cdot 10^{-5}$	4.8473	$1.10972 \cdot 10^{-9}$	2.89007031	$5.66117 \cdot 10^{-5}$	4.8473	$-3.33067 \cdot 10^{-16}$
\bar{x}	\bar{y}	S_{xx}	S_{xy}	β_1	β_0	S_{yy}
$8.57545 \cdot 10^{-6}$	0.440663 636	$7.35384 \cdot 10^{-9}$	$3.7789 \cdot 10^{-4}$	51386.62144	0	19.41844404

Tabla 33. Se describen los resultados obtenidos en la regresión lineal simple donde S_{xx} se representa como la solución de xx . S_{xy} se interpreta como la solución de xy . β_1 es la proporción que disminuye o incrementa con respecto de la variable x . β_0 se interpreta como la interferencia que es eliminada por el blanco. S_{yy} se interpreta como variabilidad total observada en la variable de respuesta.



4.1.26 Tabla 34. Análisis de varianza

Fuente de variación	Suma de cuadrados	Grados de libertad.	Cuadrado medio.	F ₀	VALOR-P
Regresión.	19.41844404	1	19.41844404	1.57541 * 10 ³³	0
Error o residual.	1.10934 * 10 ⁻³¹	9			
Total.	19.41844404		1.2326 * 10 ⁻³²		

Tabla 34. Análisis de varianza para el modelo de regresión lineal.

Los datos obtenidos para la regresión lineal y el análisis de varianza fueron los siguientes:

4.1.27 Tabla 35. Estadísticos de regresión.

Estadísticos de Regresión	
R	0.99892
R-Cuadrado	0.99783
R-Cuadrado Ajustado	0.99759
N	11
$y_i \text{ mol} = - 2.16241\text{E-}7 + 0.00002 * x_i$	

Tabla 35. Muestra los estadísticos de regresión. R² mide la proporción de la variabilidad en los datos de Y que son explicados en la regresión. R-Cuadrado Ajustado mide el ajuste en la variabilidad de Y. N mide los datos totales de la muestra. $y_i = -1.79527 + 118.22258 * x_i$ representa los resultados obtenidos para el polinomio característico en la regresión.

4.1.28 Tabla 36. Análisis de varianza

ANOVA					
	d.f.	SS	MS	F	Valor p
Regresión	1	3.00E-10	3.00E-10	4,140.96	0
Residuo	9	0	0		
Total	10	3.01E-10			



Tabla 36. Análisis de varianza en la regresión. d. f. Grados de libertad. SS suma de cuadrados. MS cuadrados medios. F mide la distribución F.

4.1.29 Tabla 37. Residuos

Residuos			
Observación	yi mol	Y Predicha	Residuo
1	0.00002	0.00002	-8.54E-08
2	0.00002	0.00002	3.32E-08
3	0.00001	0.00001	3.40E-08
4	0.00001	0.00001	3.68E-08
5	0.00001	0.00001	-2.84E-07
6	8.49E-06	8.25E-06	2.34E-07
7	6.79E-06	6.65E-06	1.33E-07
8	5.09E-06	4.89E-06	2.02E-07
9	3.39E-06	3.22E-06	1.71E-07
10	1.70E-06	2.33E-06	-6.29E-07
11	9.95E-07	8.41E-07	1.54E-07

Tabla 37. Observaciones se refiere al número de muestras en el tratamiento. yi concentración experimental molar. Y predicha concentración estimada mediante el modelo de regresión lineal. Residuos error existente entre la concentración experimental y la concentración predicha.

A continuación, se muestran las gráficos hechos en Excel y Statplus a partir de los datos obtenidos de forma experimental y teórica.

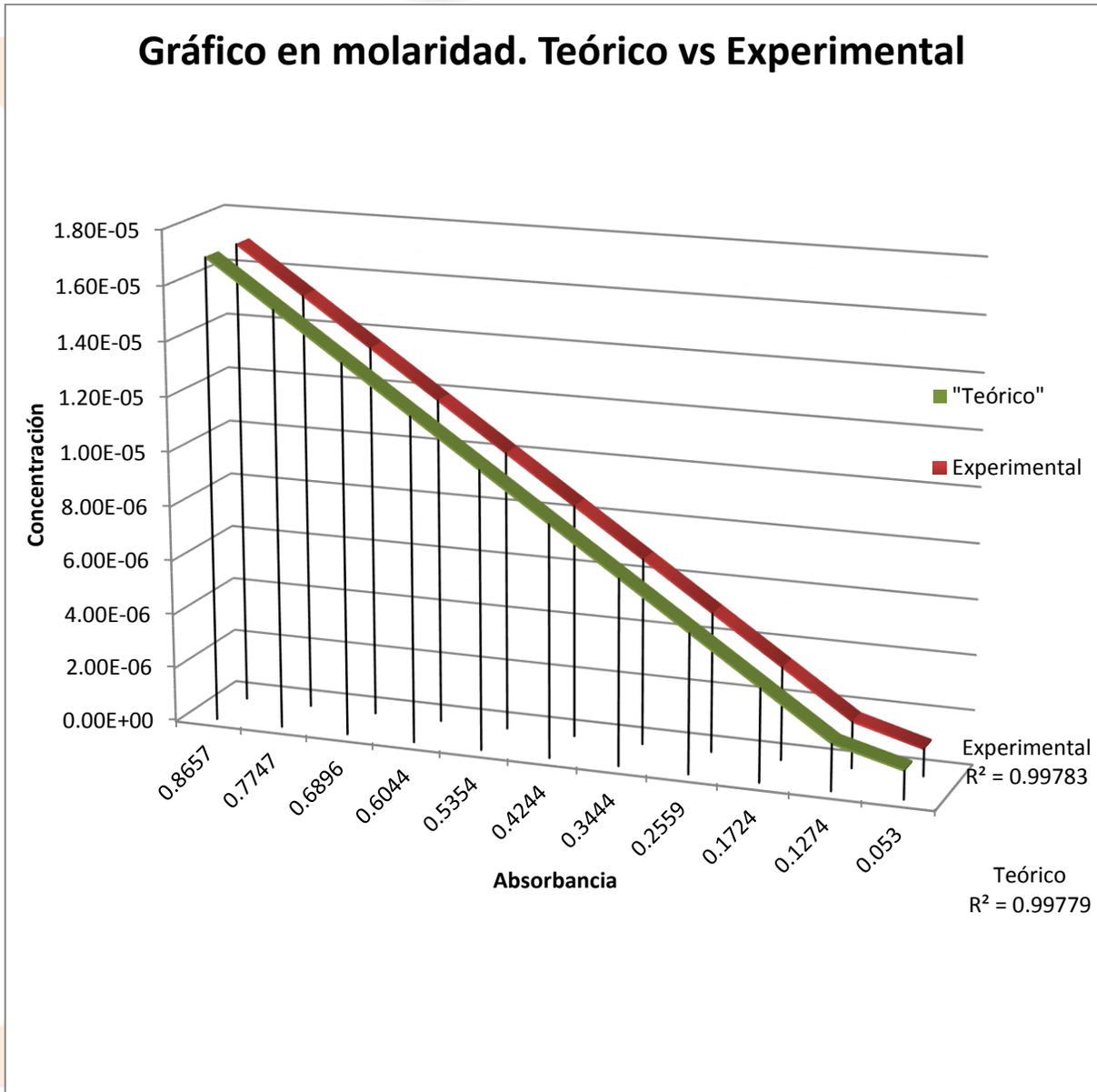


Gráfico 21. Se muestra el comportamiento de la parte experimental (línea roja) con respecto a la parte teórica (línea azul). Al calcular la variabilidad de Y que corresponden a los datos teóricos y experimentales.

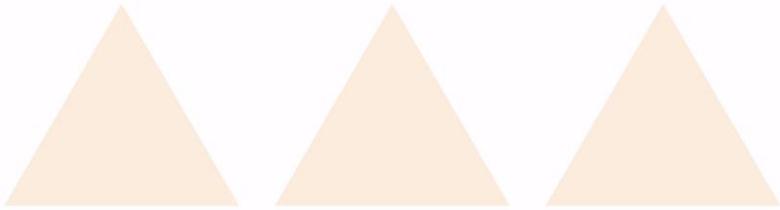


Gráfico en molaridad. Teórico vs Experimental

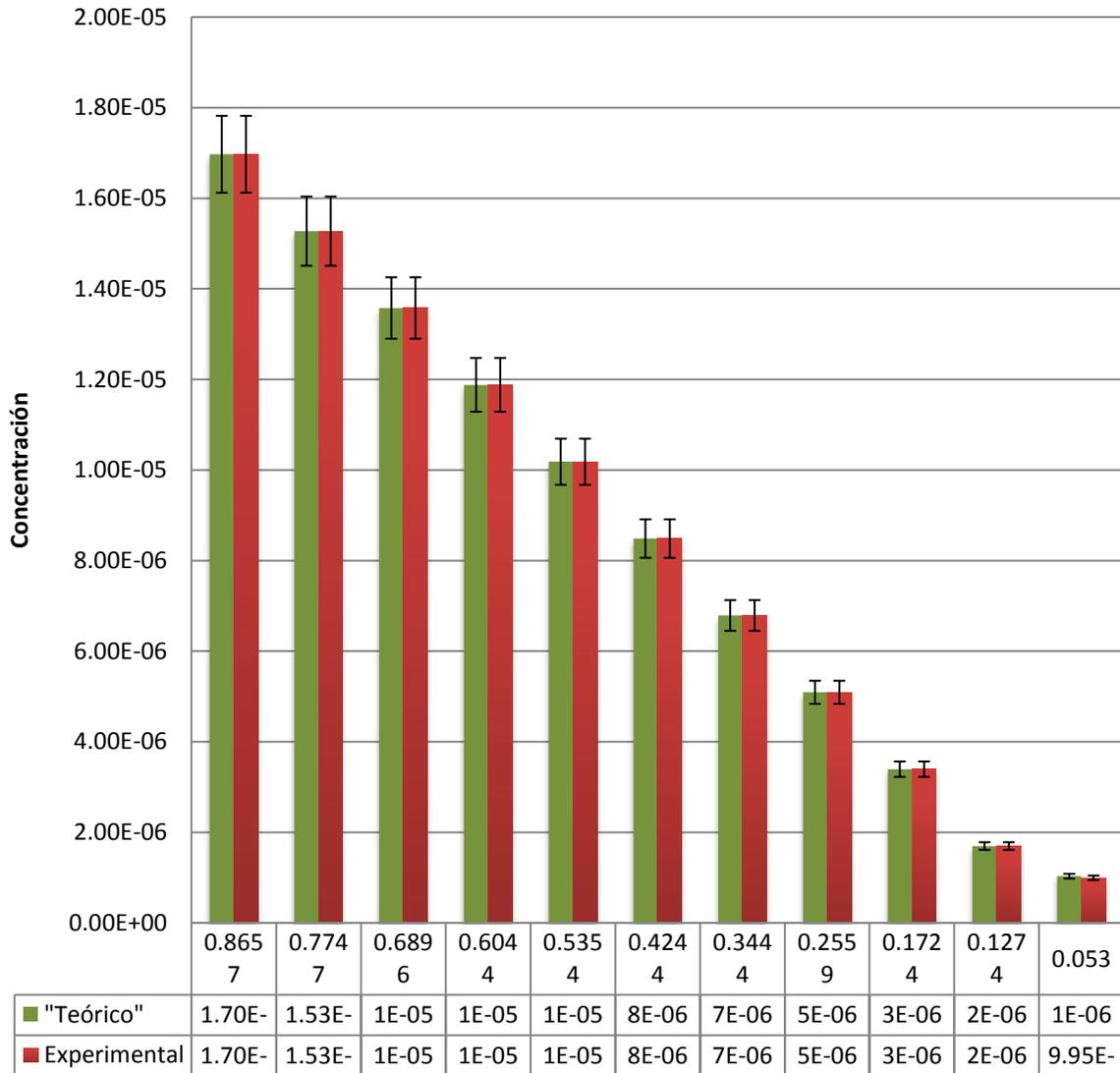


Gráfico 22. Se evaluó un rango de error entre ambas concentraciones el cual corresponde al más menos cinco por ciento comparando la parte teórica y experimental.

Diagrama de dispersión (Y Predicha, y_i mol vs. x_i)

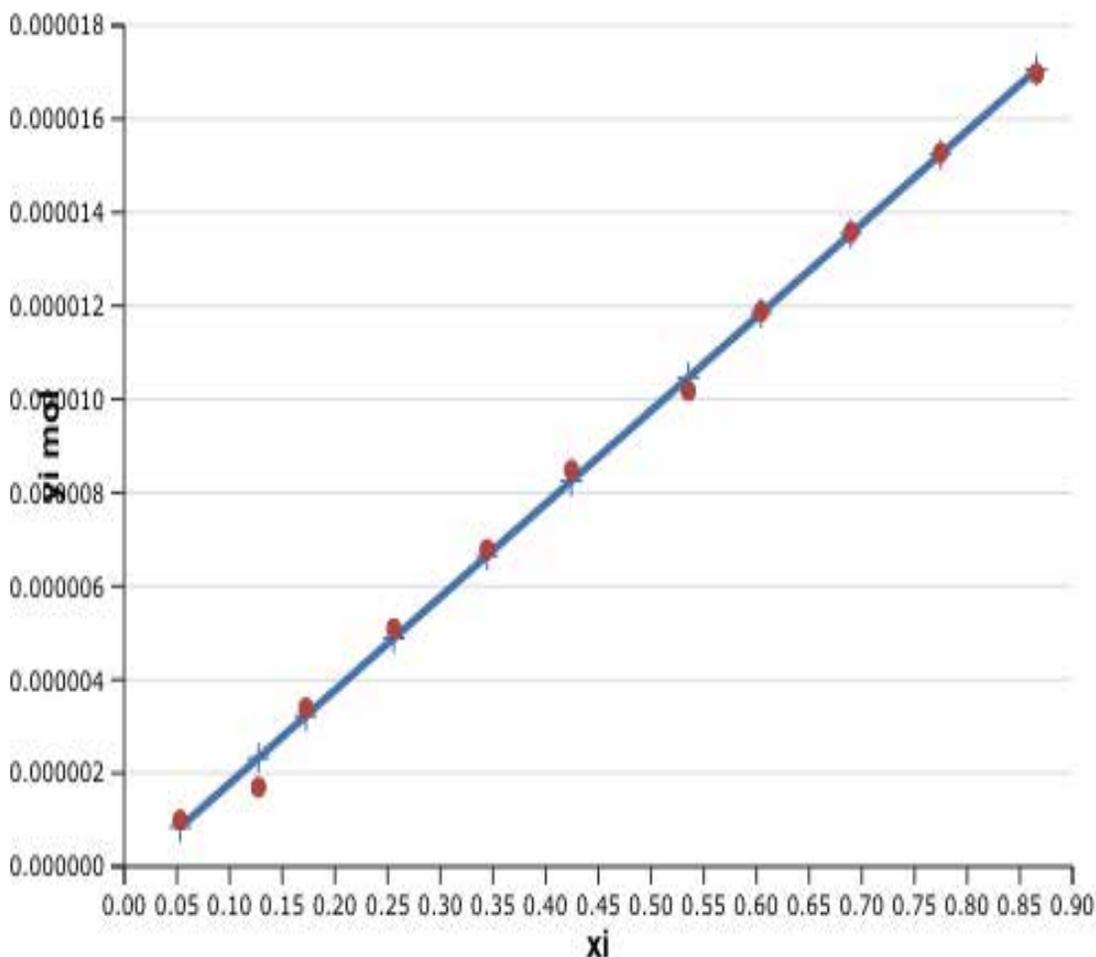
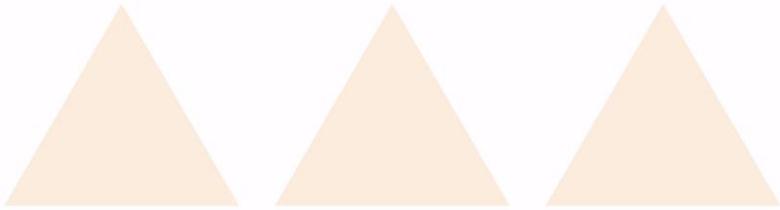


Gráfico 23. Diagrama de dispersión entre la concentración predicha y la concentración experimental contra la absorbancia.



Residuos vs xi

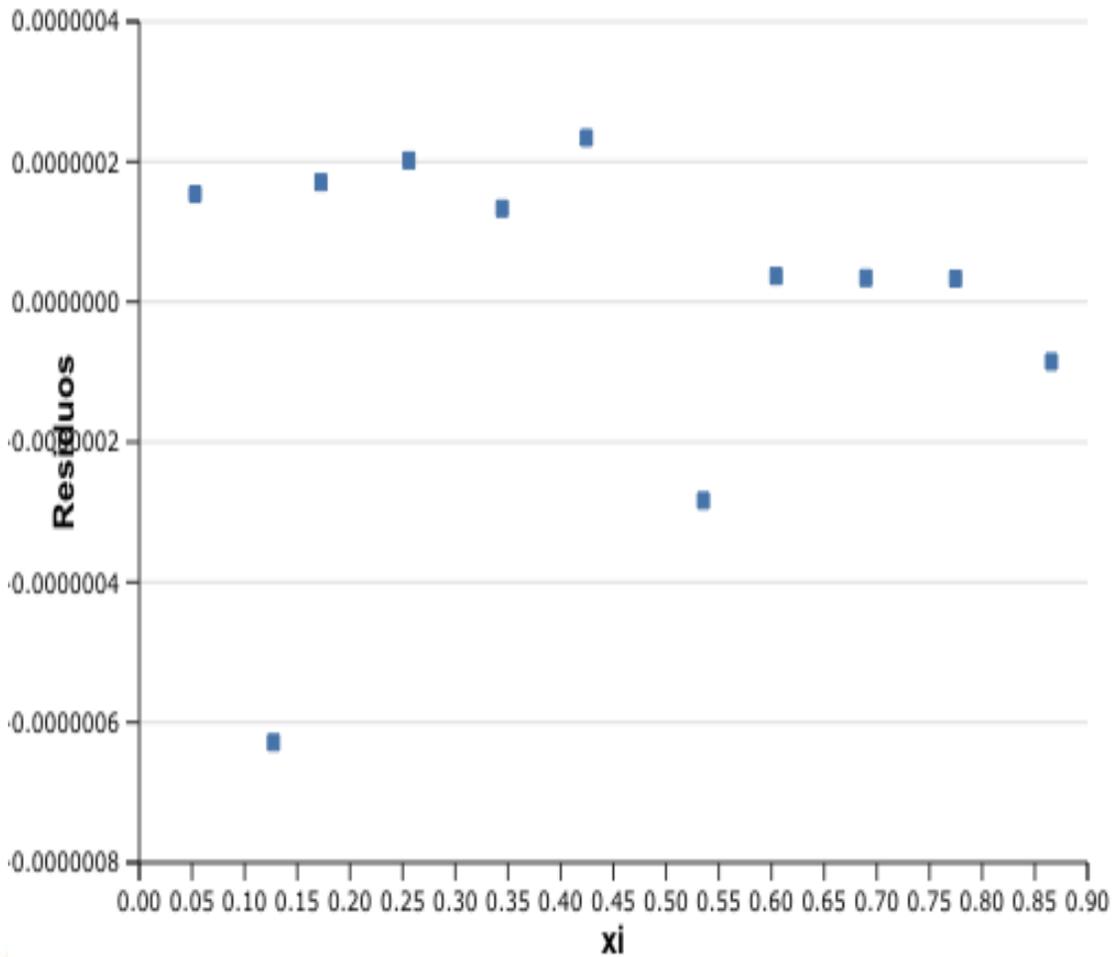


Gráfico 24. Evaluación de los residuos contra xi (absorbancia) obtenidos mediante el software StatPlus.



A continuación, se muestran los resultados obtenidos de forma experimental junto con los valores predichos por el modelo elaborado manual y con el software de StatPlus.

4.1.30 Tabla 38. Resultados del modelo teórico manual

Teórico Manual	Primer tratamiento	Segundo tratamiento	Tercer tratamiento.
Concentración molar.	0.00001165	0.00000931	0.000001031
Concentración en ppm.	69.00838423	54.91518446	6.059143624
Disminución de cromo.	30.99161577	45.08481554	93.94085638

Tabla 38. Muestra los resultados predichos para la concentración molar, en ppm y la disminución de cromo mediante el modelo de regresión lineal.

4.1.1 Tabla 39. Resultados del modelo teórico manual.

Teórico StatPlus	Primer tratamiento	Segundo tratamiento	Tercer tratamiento.
Concentración molar.	0.0000117	8.19866E-06	8.41E-07
Concentración en ppm.	69.3865	54.91610354	4.462491141
Disminución de cromo.	30.6135	45.08389646	95.53750886

Tabla 39. Muestra los resultados predichos para la concentración molar, en ppm y la disminución de cromo utilizando StatPlus mediante el modelo de regresión lineal.

4.1.1 Tabla 40. Resultados del modelo experimental.

Experimental	Primer tratamiento	Segundo tratamiento	Tercer tratamiento.
Concentración molar.	0.0000113	0.000008485	9.95E-07
Concentración en ppm.	69.594	53.75793799	4.16013
Disminución de cromo.	30	46	96

Tabla 40. Muestra los resultados predichos para la concentración molar, en ppm y la disminución de cromo utilizando StatPlus mediante el modelo de regresión lineal.



5 Conclusiones^[1]_{SEP}

Se puede observar como la condición para todos los tratamientos y concentraciones en $\hat{\beta}_0$ se cumple de manera matemática para el modelo realizado de forma manual obteniendo el valor esperado de cero por lo tanto se confirma la eliminación de interferencias, resueltas previamente por la curva de calibración obteniendo que:

$$\beta_0 = r_{\lambda,0} = 0$$

Con respecto a los cálculos realizados en el software de StatPlus la mayoría de los valores asignado para β_0 son negativos matemáticamente representa que la recta se inicia de izquierda bajo el cero, esto podría representar el parte del error con el que cuenta la predicción del modelo.

Una vez estimado el valor de β_0 analizaremos la variable β_1 la cual matemáticamente se interpreta como la pendiente de la línea, es decir, es la cantidad en que decrece o incrementa la variable Y por cada unidad que aumenta la variable X , interpretándolo en la ley de Lamber-Beer corresponde al coeficiente de proporcionalidad molar.

El análisis de varianza que se aplicó al modelo de regresión en el software de StatPlus junto con el elaborado de forma manual rechaza la hipótesis de $H_0: \beta_1 = 0$ debido a que el valor del estadístico de prueba es mayor que el valor crítico, el cual se obtiene en tablas. Esto permite probar la significancia de la regresión por lo cual se deduce que efectivamente hay una relación causa y efecto entre X y Y , que a su vez respalda al modelo mediante la calibración univariante el cual al vincularlo con la ley de Lambert-Beer reafirma el nexo que existente entre la absorbancia a una longitud de onda (r_λ) junto con la concentración del analito de interés (C_A). Este soporte teórico brinda la confianza necesaria para probar que las predicciones hechas por el modelo son las más cercanas a la realidad.



Referente a los gráficos tanto los elaborados en Excel y StatPlus se ajusta a los resultados obtenidos de forma experimental, sin embargo, en el gráfico dieciocho observamos el porcentaje de error del más menos cinco por ciento de error no se ajusta con respecto del resultado obtenido de forma experimental. Por otra parte se muestra en los gráficos de línea en 3D fueron empleados para comparar el comportamiento entre la parte experimental y la teórica, se tomó esta decisión debido a que el diagrama de dispersión no se aprecia del todo la tendencia que siguen ambas líneas, en este tipo de gráficos se calculó la proporción de la variabilidad observada la cual muestra un ajuste cercano a la realidad.

Se puede observar en los gráficos que evalúan la concentración pronosticada contra la obtenida de forma experimental como el modelo de regresión se ajusta a la realidad dado que todos los puntos se encuentran cerca de la recta. Los gráficos de residuos son de los más importantes dado que permite una mayor fiabilidad al modelo debido a que muestra un buen ajuste verificando el ajuste del mismo.

La concentración obtenida a partir de la modelación se aproxima a la generada de manera experimental, en el caso de la modelación elaborada de forma manual se presenta resultados cercanos a la realidad, sin embargo, al modelizar el tercer tratamiento con una concentración en ppm se obtuvo la mayor diferencia con respecto a los resultados experimentales, aunque al aplicar el análisis de varianza este tratamiento fue validado. El polinomio característico de este tratamiento predice la absorbancia, sin embargo, es la constante de proporcionalidad la expresión que fue utilizada para calcular la concentración. Cabe resaltar que en caso del software StatPlus la variable dependiente fue la concentración por lo que al sustituir x_i (absorbancia) es capaz de predecir la concentración en cual se aplique el polinomio característico para ese tratamiento tomando como límite superior e inferior las concentraciones obtenidas en la curva de calibración.



Si bien las predicciones de ambos modelos fueron validadas mediante el análisis de varianza existe una mayor aproximación a los resultados experimentales por parte de la modelación realizada con el software StatPlus debido al número de cifras significativas que tome el programa estadístico. Con estas predicciones se logra validar los resultados experimentales dando una mayor solides al biofiltro, en caso de aplicarlo a mayor escala este modelo servirá como referencia para evaluar las futuras concentraciones permite ahorrar recursos en este proceso.



6 Bibliografía

Ferré, J. (2005). Recuperado el 4 de Noviembre de 2017, de <http://www.quimica.urv.cat/quimio/general/calmul.pdf>

López de Alba, P. L., López, M. L., & Amador, H. J. (Febrero de 1997). *Métodos de calibración multivariante*. (J. o. Society, Ed.) Recuperado el 7 de Noviembre de 2017, de <http://www.redalyc.org/pdf/475/475411107.pdf>

Ferré, J. (Marzo de 2005). Recuperado el 20 de Noviembre de 2017, de http://www.quimica.urv.cat/quimio/general/AD_TL_Calibracisn%20Multivariante.%20EI%20modelo%20inverso.pdf

Universidad Complutense de Madrid. (2 de Febrero de 2012). Recuperado el 4 de Septiembre de 2017, de <https://www.dc.uba.ar/materias/escuela-complutense/2012/estocasticos.pdf>

Universidad EAFIT. (Mayo de 2007). Recuperado el 05 de Noviembre de 2017, de <https://s236fd42545a4589d.jimcontent.com/.../lectura-guia-8-demostracion-de-la-ley-de-beer>

Aravena, M., Caamaño, C., & Jiménez, J. (Febrero de 2007). Recuperado el 16 de Octubre de 2017, de SCIELO: <http://www.scielo.org.mx/pdf/relime/v11n1/v11n1a3.pdf>

Humberto, G. P., & Vara, S. R. (2008). En R. d. Humberto Gutiérrez Pulido, *Análisis y diseño de experimentos* (págs. 340-361). México: McGRAW-HILL/INTERAMERICANA EDITORES, S.A. de C.V.

Gómez, C. L. (2015). *Modelización Matemática Principios y Aplicaciones*. Puebla, Puebla, Mexico: Dirección de Fomento Editorial.

Gómez, S. (11 de Abril de 2014). *blogspot*. Recuperado el 07 de Septiembre de 2017, de <http://softwareanalisisdedatoscuantitativos.blogspot.mx/2014/04/tipos-de-paquetes-estadisticos.html>



Montgomery, D. C. (2004). En D. C. Montgomery, *Diseño y análisis de experimentos* (G. R. Piña, Trad., págs. 410-418). LIMUSA SA. de CV.

Perez, A. V., Tovar, C. A., Vázquez, B. J., & Guevara, V. M. (2017). Biofiltro Reductor de Cr(VI) para el Saneamiento de Aguas Contaminadas.

Perez, J. A. (7 de Junio de 2017). *Monitor Educativo*. Recuperado el 10 de Octubre de 2017, de <https://monitor.iiiipe.edu.mx/notas/la-importancia-de-los-modelos-matematicos-en-la-enseñanza-de-la-ciencia>

Porras, A. C. (Diciembre de 2010). *redalyc*. Recuperado el 2 de Noviembre de 2017, de <http://www.redalyc.org/pdf/750/75017164003.pdf>

Ogata, K. (1998). En K. Ogata, *Ingeniería de control moderna* (S. M. Martínez, Trad., págs. 1-2). México: PRENTICE-HALL HISPANOAMERICANA, S.A.



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA
METROPOLITANA DE PUEBLA

INGENIERÍA EN BIOTECNOLOGÍA

**“ELABORACIÓN Y EVALUACIÓN DE UN
BIOFILTRO DE CR(VI) EN AGUAS MODELO”**

TESIS

PARA OBTENER EL GRADO DE:

**LICENCIADO EN INGENIERÍA EN
BIOTECNOLOGÍA**

PRESENTA:

VASHTI LUZ PEREZ ALVAREZ

DIRECTORA:

DRA. ALEJANDRA TOVAR CORONA

ASESOR:

DR. FRANCISCO BERSAIN MORENO LUNA

Puebla, Pue.

Febrero, 2018

AGRADECIMIENTOS

DEDICATORIA:



INDICE GENERAL

CAPÍTULO I	9
1.1. RESUMEN	9
1.2. INTRODUCCIÓN	10
1.3. OBJETIVOS	12
1.4. HIPÓTESIS	13
CAPÍTULO II	14
MARCO TEÓRICO	14
2.1. La biotecnología y su importancia	14
2.1.1. Biotecnología ambiental	16
2.2. Química verde	17
2.2.1 Los 12 principios de la química verde	18
2.3. Metales pesados como contaminantes	20
2.3.1. Tratamientos para metales pesados en aguas residuales.	21
ANTECEDENTES	23
2.4. Cromo	23
2.5. Compuestos naturales	24
2.5.1. Metabolitos Secundarios	25
2.5.2. Actividad Antioxidante	26
2.6. Frutos Cítricos	27
2.6.1. <i>Citrus sinensis</i>	28
2.7. Agaves en la región	30
2.7.1 Agave Potatorum Zucc	31
CAPITULO III	32
MATERIAL Y MÉTODOS	32
3.1. Lugar de realización	32
3.2. Material y Reactivos	32
3.2.1. Disolución de difenilcarbazida (5 mg/mL).	34
3.2.2. Disolución madre de cromo (500 mg/L).	35
3.2.3. Disolución estándar de Cr (VI) 5 mg/L.	36
3.2.4. Disolución de ácido sulúrico 0.2 N.	36



MATERIA PRIMA	37
ENSAYOS QUÍMICOS	38
3.3. Obtención de la cáscara de <i>Citrus sinensis</i>	38
3.3.1. Obtención del extracto de Naranja	38
3.4. Soporte de biofiltro (obtención de la fibra de <i>Agave potatorum</i>)	39
DESARROLLO EXPERIMENTAL	40
3.5. Tratamiento de la muestra	40
3.5.1. Desarrollo de color	40
3.6. Técnica clorimétrica para cuantificación de Cr(VI)	40
2.6.1. Curva de calibración	40
3.7. Prueba del bagazo	41
3.8. Prueba del bagazo y extracto de <i>Citrus sinensis</i>	42
3.9. Caracterización fitoquímica de <i>Agave potatorum</i>	43
3.9.1 Técnica de análisis cualitativo	43
3.9.2 Técnica de análisis cuantitativo	45
CAPITULO IV	48
RESULTADOS Y DISCUSIÓN	48
4.1. Curva de calibración	48
4.2. Prueba del bagazo	51
4.3. Prueba del bagazo y extracto de <i>Citrus sinensis</i>	52
4.4. Técnica de análisis cualitativo	53
4.5. Técnica de análisis cuantitativo	56
CAPITULO V	63
5.1 Conclusión	63
BIBLIOGRAFÍA	64



ÍNDICE DE IMAGENES

IMAGEN 1. Louis Vauquelin	23
IMAGEN 2. Compuestos naturales	24
IMAGEN 3. Metabolitos secundarios	25
IMAGEN 4. Neutralización del antioxidante	26
IMAGEN 5. Frutos cítricos	27
IMAGEN 6. Naranja dulce	28
IMAGEN 7. Agaves en la región	30
IMAGEN 8. <i>Agave potatorum zucc</i>	31
IMAGEN 9. Espectrofotómetro Lambda 35	32
IMAGEN 10. Equipo de extracción soxhlet	33
IMAGEN 11. Difenilcarbazida	34
IMAGEN 12. Solución madre de Cr(VI)	35
IMAGEN 13. Solución estándar de Cr(VI)	36
IMAGEN 14. Hojas de <i>Agave potatorum zucc</i>	37
IMAGEN 15. <i>Citrus sinensis</i>	37
IMAGEN 16. Extracción de <i>Citrus sinensis</i>	38
IMAGEN 17. Obtención del soporte	39
IMAGEN 18. Prueba del bagazo	41
IMAGEN 19. Prueba del bagazo y extracto de <i>Citrus sinensis</i>	42
IMAGEN 20. Muestras para curva de calibración	48



ÍNDICE DE ESQUEMAS

ESQUEMA 1. Espectro UV-Vis/Curva de calibración	49
ESQUEMA 2. Grafica curva de calibración	49
ESQUEMA 3. Espectro UV-Vis de la prueba del bagazo	51
ESQUEMA 4. Espectro UV-Vis de la prueba del bagazo y <i>Citrus sinensis</i>	52
ESQUEMA 5. Resultados prueba flavonoides	53
ESQUEMA 6. Resultados prueba fenoles totales	53
ESQUEMA 7. Resultados prueba saponinas	54
ESQUEMA 8. Resultados prueba Lieberman-Burchard	54
ESQUEMA 9. Resultados prueba salkowski	55
ESQUEMA 10. Resultados prueba taninos	55
ESQUEMA 11. Resultados prueba carbohidratos	56
ESQUEMA 12. Curva de calibración flavonoides	57
ESQUEMA 13. Concentración de flavonoides en los extractos	57
ESQUEMA 14. Curva de calibración fenoles totales	58
ESQUEMA 15. Concentración de fenoles totales en los extractos	58
ESQUEMA 16. Curva de calibración polifenoles	59
ESQUEMA 17. Concentración de polifenoles en los extractos	59
ESQUEMA 18. Curva de calibración esteroides	60
ESQUEMA 19. Concentración de esteroides en los extractos	60
ESQUEMA 20. Curva de calibración azúcares reductores	61
ESQUEMA 21. Concentración de azúcares reductores en los extractos	61
ESQUEMA 22. Porcentaje de inhibición de DPPH en los extractos	62



ABREVIATURAS Y ACRONIMOS

Cr: Cromo

Cr (III): Cromo trivalente

Cr(VI): Cromo hexavalente

Cr⁶⁺: Cromo hexavalente

EPA: Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos

MAC: Concentraciones Máximas Permitidas

OMS: Organización Mundial de la Salud

OCDE: Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico.

ISEB: Sociedad Internacional de la Biotecnología Ambiental

et al: Y otros

K₂Cr₂O₇: Dicromato de potasio

ppm: Partes por millón

UV-VIS: Ultravioleta visible

H₂SO₄: Ácido Sulfúrico

FeCl₃: Cloruro férrico, Tricloruro de hierro, cloruro de hierro (III)

AlCl₃: Cloruro de aluminio

CuSO₄: Sulfato de cobre

DNS: 3,5 Dinitrosalicílico.

DPPH: 2,2-difenil-1-picrilhidracilo

CaCl₂: Cloruro de calcio

NaOH: Hidróxido de sodio

Na₂CO₃: Carbonato de sodio



CAPÍTULO I

1.1 RESUMEN

El cromo es un elemento esencial para el hombre y animales, pero concentraciones elevadas del mismo resultan tóxicas en ellos (Acosta *et al.* 2010). En la actualidad se ha establecido que diversos compuestos del cromo, en forma de óxidos, cromatos y dicromatos son contaminantes ambientales presentes en agua, suelos y efluentes de industrias, debido a esta gran problemática diversas investigaciones se han centrado en desarrollar procesos para eliminar el cromo presente en aguas residuales tales como: intercambio iónico sobre resinas poliméricas, coagulación floculación, adsorción sobre carbón activado y reducción; precipitación química y sedimentación (Acosta *et al.*, 2010 & Perez, 2017).

Sin embargo, muchas de estas metodologías resultan tener altos costos o generar subproductos a los que posteriormente se les tiene que dar otro tratamiento generando una que esto se vuelva complicado.

Es debido a esta problemática que este trabajo se centra en la aplicación de un sistema bio-reductor en aguas modelo que funciona como un excelente reductor de Cr(VI) obteniendo altos resultados en el proceso descontaminante aplicando la normatividad oficial para la determinación de cromo hexavalente en aguas residuales, con el fin de implementarlo a nivel industrial, siendo este un método económico, factible y eco-amigable diferente a los procesos químicos ya que, se trata de una alternativa sustentable al estar compuesto por bagazo de *Agave potatorum* y un extracto orgánico de la naranja dulce (*Citrus sinensis*) que permite disminuir altas concentraciones de dicho metal.



1.2. INTRODUCCIÓN

Las aguas residuales son materiales derivados de la actividad industrial y de los residuos domésticos, los cuales por razones de salud pública no pueden ser vertidos a los cursos de aguas corrientes o lagos, éstos son una fuente de contaminación y daño potencial para cualquier ser vivo. A pesar de las recomendaciones y ordenanzas, en los últimos años, los ambientes naturales han recibido un creciente aporte de efluentes industriales y domésticos que han llevado al deterioro de muchos cursos de agua haciéndolos incompatibles con la vida (García, 2007).

Entre los principales contaminantes localizados en los efluentes, destacan una gran cantidad de metales pesados como el arsénico, cadmio, mercurio, cromo, plomo y zinc (Siebe, 2013). Específicamente, el cromo es uno de los elementos que pueden encontrarse en las aguas residuales, la mayoría procedentes de industrias metalúrgicas, galvanoplásticas y del cuero. Su toxicidad depende del estado de oxidación y concentración en que se encuentra, siendo de especial importancia la eliminación de cromo hexavalente presente en los sistemas acuosos, por su reconocido carácter cancerígeno (Arauzo, 2003). Las concentraciones de Cr (VI) en aguas residuales que se vierten al ambiente varía de docenas a cientos de metros cúbicos por hora. Aun cuando internacionalmente las Concentraciones Máximas permitidas (MAC) en el ambiente son 0,1 ppm de Cr (VI) y 0,5 ppm de Cr (III) (García, 2007). Un claro ejemplo son los efluentes de industrias del cuero, los cuales alcanzan concentraciones de cromo trivalente hasta de 450 ppm, superando las disposiciones de la Organización Mundial de la Salud para aguas de consumo, que especifica un máximo de 1 ppm. El cromo trivalente el cual, generalmente se encuentra de manera natural no es de gran toxicidad, pero bajo cierta condición del medio se oxida, transformándose en un elemento más peligroso es decir el cromo hexavalente. (WHO, 1971 & Higuera 2005).



Con base en lo anterior, mediante esta propuesta se plantea el desarrollo de un sistema absorbente altamente eficiente capaz de retirar Cr (VI) de efluentes contaminados con dicho metal; este absorbente es obtenido a partir de metodologías basadas en química verde.

En la actualidad se ha despertado un enorme interés en procesos sustentables que reduzcan o eliminen el uso y/o la generación de sustancias peligrosas nocivos para la salud humana o el medio ambiente. (Zaror, 2002). En este sentido y con el fin de eliminar el cromo presente en aguas residuales en este trabajo se presenta la implementación de un sistema bioreductor el cual permite disminuir altas concentraciones de este metal utilizando, un soporte proveniente de *Agave potatorum* y un extracto natural obtenido de la naranja dulce (*Citrus sinensis*).



1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo General

Desarrollar y evaluar un sistema bioreductor partiendo de un soporte (bagazo) de *Agave potatorum* y un extracto de cáscara de naranja dulce (*Citrus sinensis*) para disminuir altas concentraciones de cromo hexavalente en aguas modelo a través de procesos biotecnológicos.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Obtener la fibra procedente *Agave potatorum* a partir de trituración, y extracción la cual se utilizará como soporte en el sistema.
- Obtener un extracto orgánico procedente de la cascara de naranja dulce (*Citrus Sinensis*) obtenido a través de la metodología Soxhlet para ser utilizado como bioreductor.
- Realizar análisis cualitativos y cuantitativos para la identificación de metabolitos presentes en los extractos obtenidos de *Agave potatorum*.
- Evaluar la actividad de cada uno de los componentes que constituyen el biofiltro frente al cromo hexavalente, dando seguimiento por espectrofotometría UV-Vis de acuerdo con la norma oficial mexicana NMX-AA-044-SCFI-2001.



1.4. HIPÓTESIS

1.4.1. Hipótesis general

Debido a la gran cantidad de compuestos y propiedades benéficas que contienen ambos componentes de nuestro sistema (la cáscara de *Citrus sinensis* y bagazo de *Agave potatorum*) a través de metodologías eco-amigables, se comprobará que existe un efecto reductor en los iones de cromo hexavalente presente en aguas modelo.

1.4.2. Hipótesis alternativas

El seguimiento de concentración de cromo hexavalente podrá ser evaluado espectroscópicamente de acuerdo con la norma oficial mexicana NMX-AA-044-SCFI-2001 (Análisis de agua- Determinación de cromo hexavalente en aguas naturales, potables, residuales y residuales tratadas- Método prueba) con soluciones de cromo hexavalente de concentración conocida.



CAPÍTULO II

MARCO TEÓRICO

2.1. Biotecnología y su importancia

La rápida industrialización, el continuo incremento de la urbanización, el aumento de la producción agroganadera intensiva o la explotación industrial, entre muchísimos otros factores, han provocado un incremento evidente y preocupante de la calidad del medio ambiente. A lo largo de la historia decenas de miles de productos y derivados químicos han formado parte del consumo de nuestras vidas, representando los mismos el aporte de grandes beneficios en la salud, alimentación, vestimenta, entretenimiento, sin embargo, también han sido responsables del deterioro del medio ambiente contaminando el agua, el aire y los suelos. Miles de toneladas de residuos tóxicos abandonados en lugares inseguros, el deterioro de la capa de ozono, niños que nacen con deformaciones y altos niveles de plomo en el ambiente, son noticias de todos los días. Es precisamente aquí, donde surge un gran dilema para la humanidad ya que ésta debe cubrir necesidades, pero al mismo tiempo se muestra preocupada por evitar que su entorno ecológico se deteriore (Delgado, 1998).

Una de las disciplinas científicas que está generando un gran interés y un acelerado crecimiento es la biotecnología que, de acuerdo con la OCDE, la define como la aplicación de la ciencia y la tecnología a organismos vivos, así como también a partes, productos y modelos de estos para alterar materiales vivos o no vivos para la producción de conocimientos, bienes y servicios (OCDE 2002).



Al tratarse de una tecnología, puede aplicarse a una gran cantidad de áreas o sectores independientes de la salud, como son la agricultura, la alimentación, el medio ambiente, la producción industrial o la energía. Por tanto, la Biotecnología no es en sí misma una ciencia, es un enfoque multidisciplinar que involucra varias disciplinas y ciencias (biología, bioquímica, genética, virología, agronomía, ingeniería, química, y medicina, entre otras) y representa una considerable diversidad de actividades industriales.

Como consecuencia, la Biotecnología tiene un impacto global a tres niveles:

1. **Naturaleza:** al tratarse de una tecnología, puede aplicarse a una gran cantidad de áreas o sectores como son la medicina, industria farmacéutica, agricultura, alimentación, medio ambiente, producción industrial o energía.
2. **Alcance,** pues la población demanda a lo largo de su vida atención sanitaria de calidad, alimentos saludables y una adecuada gestión y conservación de los recursos naturales, así como del medio ambiente.
3. **Economía:** puede considerarse uno de los principales motores del crecimiento económico mundial tanto en economías desarrolladas como en economías emergentes (Sánchez, 2011)

La biotecnología promete hacer contribuciones significativas en los campos de cuidado de la salud, inocuidad de los alimentos, protección del medio ambiente, procesamiento bioindustrial y el desarrollo de formas sostenibles de agricultura. Los métodos de la biotecnología ahora permiten una más rápida y profunda resolución a los problemas que actualmente están presentes (Callow, 1997).

En la actualidad diversas investigaciones se dedican a la búsqueda de un sin fin de procesos sustentables, altamente competitivos y que sean capaz de generar bienestar.



2.1.1 Biotecnología ambiental

La ISEB define a la biotecnología ambiental como la integración de la ciencia y la ingeniería para el desarrollo, uso y regulación de los sistemas biológicos para la descontaminación del medio ambiente (tierra, aire, agua) y para el desarrollo de procesos amigables con el medio ambiente (tecnologías verdes y desarrollo sostenible). Esta se entiende de forma general como la aplicación de los procesos biológicos modernos para la protección y recuperación de la calidad del medio ambiente (Scragg, 2006).

El interés por la Biotecnología Ambiental y su impacto sobre la actividad económica es obviamente creciente dado el continuo incremento de la contaminación ambiental y el paralelo incremento en las normativas ambientales, que convierten procesos productivos contaminantes, antes permitidos, en procesos económicamente prohibitivos. La biotecnología ambiental cubre un espectro más amplio que el meramente relacionado con el control de la contaminación. Y por lo mismo, una buena parte de la biotecnología debe ser considerada “ambiental”, dado que una importante cantidad de recursos farmacéuticos, y de otro interés económico, proceden de la existencia y mantenimiento de la biodiversidad de la tierra. Por otra parte, la búsqueda de métodos de producción de moléculas por vías biológicas en sustitución de la síntesis química, uno de los objetivos de la biotecnología, no sólo puede ser industrialmente necesario, sino también puede reducir el uso de reactivos y subproductos, y ser por tanto económica y ambientalmente preferible. Muchos otros aspectos de la biotecnología dependen de la naturaleza o tienen en mayor o menor medida importantes implicaciones ambientales.

Los crecientes problemas ambientales y sanitarios relacionados con la contaminación y la creciente sensibilidad ambiental hacen de la biotecnología ambiental una de las actividades con mayor proyección e interés para la sociedad (Bécares, 2014).



2.2. Química Verde

El concepto de química verde está íntimamente asociado con la prevención de la contaminación ambiental mediante el diseño de procesos y productos químicos que no posean propiedades dañinas al medio ambiente (Meléndez, 2008).

La química verde es sinónimo de salud y de sostenibilidad ambiental. Básicamente, la química verde u orgánica está orientada a buscar nuevas formas de sintetizar sustancias químicas para lograr una química más amigable con la salud y el entorno. El simple hecho de tener en consideración el posible impacto que puede implicar una nueva sustancia, ya sea a nivel ambiental o humano- supone una diferencia clave con respecto a la química convencional. En este tipo de química, desde la misma fase de diseño y desarrollo de las nuevas sustancias se tiene en cuenta el potencial impacto que representan las fórmulas tradicionales para ofrecer alternativas más saludables y/o sustentables (Salvatella, 2016).

2.2.1. Los 12 principios de la Química Verde

Estos principios desarrollados por Warner y Arnas nos permiten analizar procesos y establecer qué tan “verde” puede ser una reacción química, un proceso industrial o un producto.

1. Es preferible evitar la producción de un residuo que tratar de limpiarlo una vez que se haya formado.
2. Los métodos de síntesis deberán diseñarse de manera que incorporen al máximo, en el producto final, todos los materiales usados durante el proceso.
3. Siempre que sea posible, los métodos de síntesis deberán diseñarse para utilizar y generar sustancias que tengan poca o ninguna toxicidad, tanto para el hombre como para el medio ambiente.



4. Los productos químicos deberán ser diseñados de manera que mantengan su eficacia a la vez que reduzcan su toxicidad.
5. Se evitará, en lo posible, el uso de sustancias auxiliares (disolventes, reactivos de separación, etcétera), y en el caso de que se utilicen se procurará que sean lo más inocuas posible.
6. Los requerimientos energéticos serán catalogados por su impacto medioambiental y económico, reduciéndose todo lo posible. Se intentará llevar a cabo los métodos de síntesis a temperatura y presión ambiente.
7. La materia prima ha de ser preferiblemente renovable en vez de agotable, siempre que sea técnica y económicamente viable.
8. Se evitará en lo posible la formación de derivados (grupos de bloqueo, de protección/desprotección, modificación temporal de procesos físicos/químicos).
9. Se emplearán catalizadores (lo más selectivos posible) en vez de reactivos estequiométricos.
10. Los productos químicos se diseñarán de tal manera que al finalizar su función no persistan en el medio ambiente, sino que se transformen en productos de degradación inocuos.
11. Las metodologías analíticas serán desarrolladas posteriormente para permitir una monitorización y control en tiempo real del proceso, previo a la formación de sustancias peligrosas.
12. Se elegirán las sustancias empleadas en los procesos químicos de forma que se minimice el potencial de accidentes químicos, incluidas las emanaciones, explosiones e incendios (Meléndez, 2008).



Las tecnologías de la Química Verde pueden clasificarse en alguno de los siguientes enfoques:

- Hacer verde las condiciones de reacción en la síntesis tradicional, por ejemplo, sustituir un disolvente orgánico por agua, no usar disolventes, emplear métodos que requieran menores tiempos de reacción, con el consiguiente ahorro de tiempo y energía.
- Hacer verde una síntesis que emplea una sustancia tradicional cambiándola, por ejemplo: por biomasa en lugar de materias procedentes de reservas petroquímicas.
- Usar procesos catalíticos en lugar de reactivos estequiométricos, que además puedan reciclarse.
- Sintetizar nuevas sustancias con las mismas propiedades que la sustancia a la que sustituye, pero menos tóxicas. Por ejemplo, el uso de plaguicidas que sean tóxicos sólo sobre los organismos sobre los que se aplica y que al biodegradarse produzca sustancias beneficiosas sobre el medio ambiente.
- Según el código de conducta de la American Chemical Society: los químicos tienen la responsabilidad profesional de servir al interés público, al bienestar y al avance del conocimiento científico, preocuparnos de la salud y el bienestar de nuestros compañeros, consumidores y de la comunidad en general, comprender y anticiparnos a las consecuencias medioambientales de nuestro trabajo, evitando así la contaminación y protegiendo al medioambiente (Gutiérrez, 2008).



2.3. Metales pesados como contaminantes

La contaminación del ambiente con metales tóxicos surge como resultado de actividades humanas, principalmente industriales, sin embargo, fuentes como la agricultura y la eliminación de residuos también contribuyen. Estos contaminantes son descargados principalmente en los ambientes acuáticos y pueden alcanzar concentraciones elevadas, especialmente cerca del sitio de descarga. Los efectos de los metales sobre el funcionamiento de los ecosistemas varían considerablemente y son de gran importancia económica y de salud pública.

Los metales pesados constituyen un grupo cercano a los 40 elementos de la tabla periódica, el rasgo distintivo de la fisiología de los metales pesados es que aun cuando muchos de ellos son esenciales para el crecimiento, se ha reportado que también tienen efectos tóxicos en las células, principalmente como resultado de su capacidad para alterar o desnaturalizar las proteínas. Debido a su movilidad en los ecosistemas acuáticos naturales y a su toxicidad para las formas superiores de vida, los iones de metales pesados presentes en los abastecimientos de agua superficiales y subterráneos, se le ha dado prioridad como los contaminantes inorgánicos más importantes en el ambiente. Aun cuando se encuentren presentes en cantidades bajas e indetectables, la recalcitrancia y consiguiente persistencia de los metales pesados en cuerpos de agua, implica que a través de procesos naturales la concentración de estos puede llegar a ser tan elevada que empiece a ser tóxica (Cañizares, 2000).



2.3.1. Tratamientos para metales pesados en aguas residuales

Las aguas residuales contienen un gran número de metales pesados entre los que se pueden destacar níquel, manganeso, plomo, cromo, cadmio, zinc, cobre, hierro y mercurio, entre otros. Todos ellos son catalogados como sustancias contaminantes, los cuales deben tenerse obligatoriamente en consideración para fijar valores límites, aunque algunos de ellos sean imprescindibles para el desarrollo de la vida biológica (Simón, 2008).

El tratamiento de aguas residuales es necesario para la prevención de la contaminación ambiental y del agua, al igual que para la protección de la salud pública. Diversas opciones para el tratamiento de aguas pueden ayudar a reducir los efectos de contaminación ambiental. Sin embargo, existen otros tipos de residuos peligrosos lo cuales no pueden ser eliminados a través de métodos convencionales de tratamiento y que además causan grandes daños y efectos tóxicos al medio ambiente y a la salud de aquellos que reúsan o se exponen ante estas aguas (Reynolds, 2002).

Algunos métodos de eliminación para retirar metales pesados de las aguas residuales son:

Precipitación química:

Las operaciones de precipitación y sedimentación química, llevadas a cabo de manera independiente o en combinación con reacciones de oxidación-reducción, se utilizan ampliamente para la eliminación de metales.



La osmosis inversa constituye una alternativa para la eliminación de metales de corrientes residuales de bajo caudal.

Intercambio iónico

Para la eliminación de metales pesados en disoluciones diluidas resultan aplicables los sistemas de intercambio iónico. Las resinas que se emplean son resinas de intercambio catiónico que se clasifican en fuerte o débilmente ácidas.

Oxidación-Reducción

Las reacciones químicas de oxidación-reducción se emplean para reducir la toxicidad o la solubilidad, o para transformar una sustancia en otra más fácilmente manipulable. Como se ha visto con anterioridad esta operación mayoritariamente se combina con la precipitación química.

Las reacciones químicas de reducción se emplean principalmente para el tratamiento de corrientes que contienen cromo hexavalente, mercurio y plomo. Los agentes reductores más comunes son el dióxido de azufre, sales de sulfitos y sales de hierro (Simón, 2008).



ANTECEDENTES

2.4. Cromo

El cromo fue descubierto en 1797 por el químico francés Louis Vauquelin, quien le dio el nombre de cromo (del griego *chroma*, “color”), en función de los diversos colores que es posible extraer de los compuestos que forma este elemento. El cromo ocupa el vigésimo primer lugar en abundancia sobre la tierra y es el sexto metal de transición más abundante; se encuentra en un amplio rango de estados de oxidación que van desde -2 hasta +6. En el ambiente, por ser los más estables, predominan sus estados de oxidación (III) y (VI), cuya toxicidad, movilidad y biodisponibilidad tiene efectos contrastantes (Levina, 2005 & Mohan 2006).



Imagen 1. Louis Vauquelin

Este elemento se encuentra normalmente en rocas, animales, plantas y el suelo. Puede existir en formas diferentes y éstas determinan su estado líquido, sólido o gas. El cromo (0), también denominado cromo metálico, se usa en la fabricación de acero y el cromo (III) y (VI) se utilizan en el cromado, en colorantes y pigmentos, en curtido del cuero y en la preservación de la madera y, en cantidades pequeñas, en barrenas para la extracción de petróleo, inhibidores de corrosión, en la industria textil (EPA, 2010).

2.5. Compuestos naturales

Las plantas son una gran fuente de productos naturales biológicamente activos, muchos de los beneficios de las plantas, son conocidos y utilizados desde la antigüedad, debido a sus diversas propiedades antimicrobianas, insecticidas, antioxidantes, etc. Estos efectos son debidos a compuestos que son sintetizados específicamente por las células de las plantas, que no son estrictamente necesarios para el crecimiento o reproducción, pero cuya presencia ha sido demostrada genética, fisiológica o bioquímicamente. Estos se denominan **metabolitos secundarios**. En la actualidad existen técnicas de extracción que permiten obtenerlos y concentrarlos para su uso en diferentes aplicaciones (Sáiz, 2010).



Imagen 2. Compuestos naturales

2.5.1 Metabolitos secundarios

Las plantas en su medio han desarrollado un gran número de estrategias defensivas, contra una gran variedad de organismos invasores y agentes abióticos causantes de una diversidad de agobios ambientales. Entre las estrategias defensivas, se encuentra la síntesis de metabolitos que actúan en respuesta a estímulos asociados con el organismo invasor.

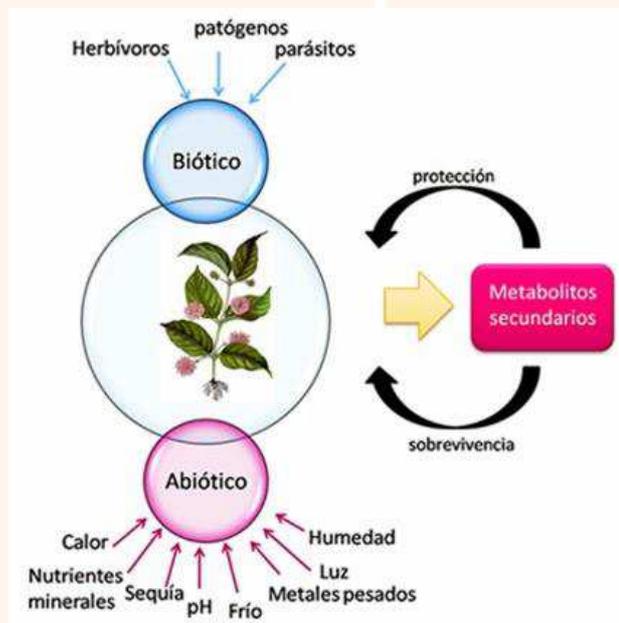


Imagen 3. Metabolios secundarios

Los metabolitos secundarios más que subproductos, tienen una función en la interacción de las plantas con su ambiente y otros organismos para proveer una defensa contra la infección, depredación o agobio ambiental (Alcántar, 2005).

2.5.2. Actividad Antioxidante

Un antioxidante es una sustancia capaz de neutralizar la acción oxidante de los radicales libres mediante la liberación de electrones en nuestra sangre, los que son captados por los radicales libres (Avello, 2006). Los Antioxidantes son compuestos los cuales pueden inhibir o retardar la oxidación de otras moléculas inhibiendo la iniciación y/o propagación de las reacciones en cadena de los radicales libres. Los antioxidantes se dividen en dos categorías principalmente que son: sintéticos y naturales. En general los antioxidantes sintéticos son compuestos de estructuras fenólicas con varios grados de sustitución alquílica, mientras que los antioxidantes naturales pueden ser: compuestos fenólicos (tocoferoles, flavonoides y ácidos fenólicos), compuestos nitrogenados (alcaloides, derivados de la clorofila, aminoácidos y aminos) o carotenoides, así como el ácido ascórbico (Muñoz, 2009).

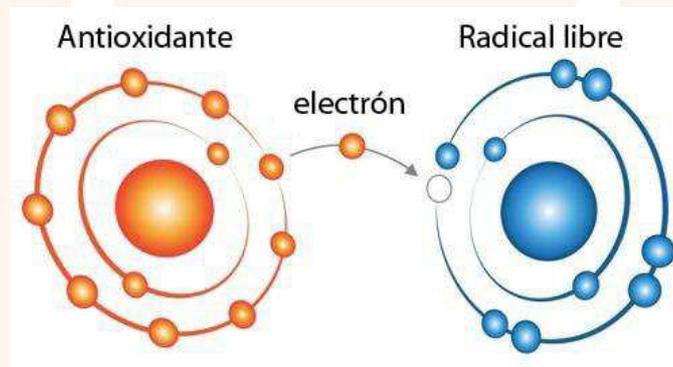


Imagen 4. Neutralización del antioxidante

La principal fuente de antioxidantes naturales son las frutas y vegetales los cuales contienen compuestos fenólicos en abundancia. Estos compuestos están estrechamente asociados con el color y sabor de los alimentos de origen vegetal, así como su calidad nutricional por sus propiedades antioxidantes comprobados (Rincón 2005).

2.6. Frutos cítricos

Los cítricos han sido utilizados en diversas áreas con múltiples aplicaciones a lo largo de la historia. Las variedades más comunes que se pueden encontrar son los: limones, naranja, mandarina y pomelo. Sus orígenes se encuentran en el continente asiático, sin embargo, con el paso de los años se han extendido por todo el mundo.

Las plantas pertenecientes al género *Citrus* son bien conocidas por el hombre, no solo por el consumo de sus frutos de alta demanda a nivel mundial, sino también por sus propiedades curativas, un ejemplo de ello son las naranjas y mandarinas, las cuales contienen un cierto número de carotenoides y también un alto contenido en vitamina C y flavonoides (Alsina, 2012 y Nuñez, 2011).



Imagen 5. Frutos cítricos

2.6.1. *Citrus sinensis*

Citrus es un género grande que incluye varias especies cultivadas importantes incluyendo: *Citrus reticulata* (mandarina), *Citrus limon* (limón), *Citrus grandis* (pomelo) *Citrus paradisi* (pomelo) y *Citrus sinensis* (naranja dulce).

La naranja es una fruta de nombre científico *Citrus sinensis*, que consta de varios carpelos o gajos fáciles de separar, cada uno de los cuales tiene una pulpa amplia color variable entre el anaranjado y el rojo, jugosa y succulento; además posee varias semillas y numerosas células jugosas, cubiertas por un exocarpo cariáceo o cascara de un color anaranjado cuyo interior es lanco, que contiene numerosas glándulas llenas de aceites esenciales. Se consume como fruta fresca, en jugo y enlatados; igualmente se utiliza para elaborar mermelada y para la obtención de aceites esenciales de la cascara (Xu, Q. et al. 2013).



Imagen 6. Naranja dulce



Se ha estudiado que la naranja dulce (*Citrus sinensis*) presenta un alto contenido de compuestos fenólicos, ácido ascórbico y algunos minerales que son efectivos antioxidantes naturales. Es posible extraer pectina cítrica, aceites esenciales, pigmentos y productos cítricos especiales; así como también compuestos bioactivos que tienen efectos benéficos en la salud, tales como la fibra y los polifenoles en especial flavonoides.

El género *Citrus* se ha caracterizado por una acumulación sustancial de glicósidos de flavonona, los cuales no se encuentran en otras frutas. La vitamina C y los carotenoides juegan un papel importante en la prevención de diversas enfermedades mediante la neutralización de procesos oxidativos. Actualmente en diversos estudios se ha encontrado que las cascarras de los frutos son las principales fuentes de antioxidantes naturales, por lo que se ha propuesto utilizar estos subproductos de la industria como antioxidantes naturales (Rincón, 2005).

2.7. Agaves en la región

Entre las plantas más conspicuas del paisaje mexicano que forman parte del patrimonio cultural e histórico, en especial de las zonas áridas y semiáridas de México, están los agaves o magueyes, considerados especies clave en esas regiones, tanto por su abundancia como por la cantidad de recursos que proporcionan a otros organismos. En México, los agaves tienen una gran importancia económica y cultural principalmente en la antigüedad para numerosos pueblos que los aprovecharon como fuente de alimento, bebida, medicina, combustible, etc. Además, fueron las primeras plantas aprovechadas por los pobladores. Los agaves son considerados plantas excepcionales que albergan en su genoma una enorme riqueza genética que ofrece diversas características biológicas con amplias aplicaciones biotecnológicas entre las cuales podemos destacar su gran adaptabilidad y capacidad de subsistir aun en ambientes medioambientales extremos, y por sus características metabólicas, bioquímicas, fisiológicas y morfológicas, que les permiten lograr dicha adaptación y sobrevivencia (García, 2010 & Martínez, 2007).

Imagen 7. Agaves en la región



2.7.1. *Agave potatorum* zucc

Agave potatorum crece como una roseta basal con entre 30 a 80 hojas planas con forma de espátulas de hasta 25 cm de largo y con un borde de flequillos cortos y afilados, con espinas oscuras y que termina en una aguja de hasta 4 cm de largo. Las hojas son de color blanco plateado, con la carne de color lila con decoloración verde ha rozado en las puntas. El tallo floral puede ser desde 2,5 hasta 5 m de largo cuando está completamente desarrollado con pálidas flores verdes y amarillas. El *Agave potatorum* es nativa de las zonas desérticas parciales de México desde Puebla hasta el sur de Oaxaca.

El nombre "*potatorum*", proveniente de la palabra latina "*potator*", que significa "de los bebedores" en referencia al uso de esta planta en la fabricación de bebidas alcohólicas (García, 2010).

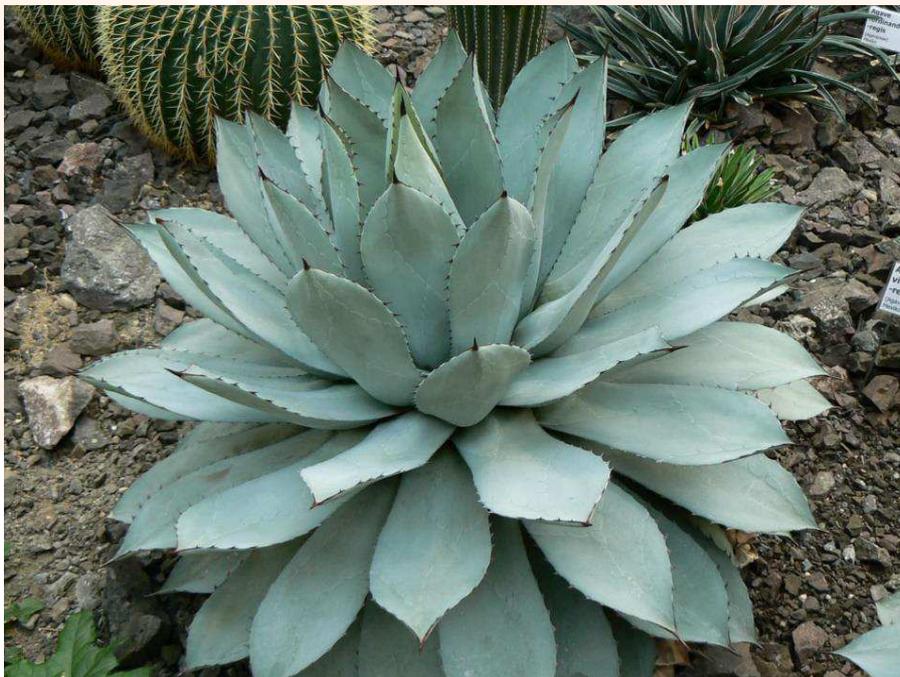


Imagen 8. *Agaves potatorum*



CAPÍTULO III MATERIAL Y MÉTODOS

3.1 Lugar de realización

El presente trabajo de investigación se llevó a cabo en los laboratorios de biotecnología en la Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla ubicada en Calle Popocatepetl S/N. Colonia 3 Cerritos. Heróica Puebla de Zaragoza. C.P. 72480. Teléfono (01) 222 582 5222 durante el periodo...

3.2 Material y Reactivos

Se utilizó un Espectrofotómetro Ultravioleta-Visible Perkin -Elmer Modelo Lambda 35, de doble haz y con esfera de integración, con celdas de cuarzo de 1 cm de paso de luz, para dar seguimiento a las pruebas de nuestro sistema.



Imagen 9. Espectrofotómetro Lambda 35

Para la obtención de los extractos, se utilizó el equipo de extracción tipo Soxhlet usando como solvente Alcohol Etílico Absoluto.



Imagen 10. Equipo de extracción Soxhlet

3.2.1 Disolución de difenilcarbazida (5 mg/mL).

Pesar aproximadamente y con precisión 250 mg de difenilcarbazida y disolver en 50mL de acetona. Almacenar en frascos de color ámbar con tapa con recubierta de teflón; esta disolución es transparente al momento de prepararla, después toma un color amarillo claro. Descartar la disolución cuando comience a decolorarse, debe conservarse en refrigeración.

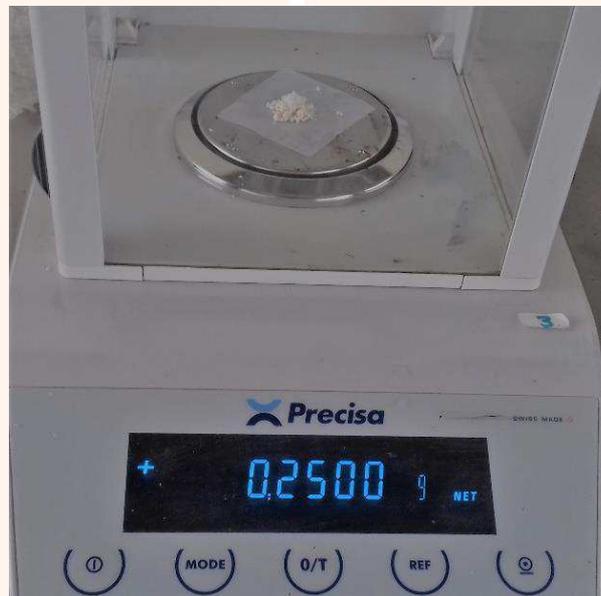


Imagen 11. Difenilcarbazida

3.2.2. Disolución madre de cromo (500 mg/L).

Secar aproximadamente 2 g de $K_2Cr_2O_7$ en horno a $105^{\circ}C$ por 1 h enfriar en el desecador. Pesar aproximadamente y con precisión 141,4 mg de dicromato de potasio, disolver con agua y aforar a 100mL, 1mL de esta disolución es equivalente a 500,0 μg de Cr (VI).

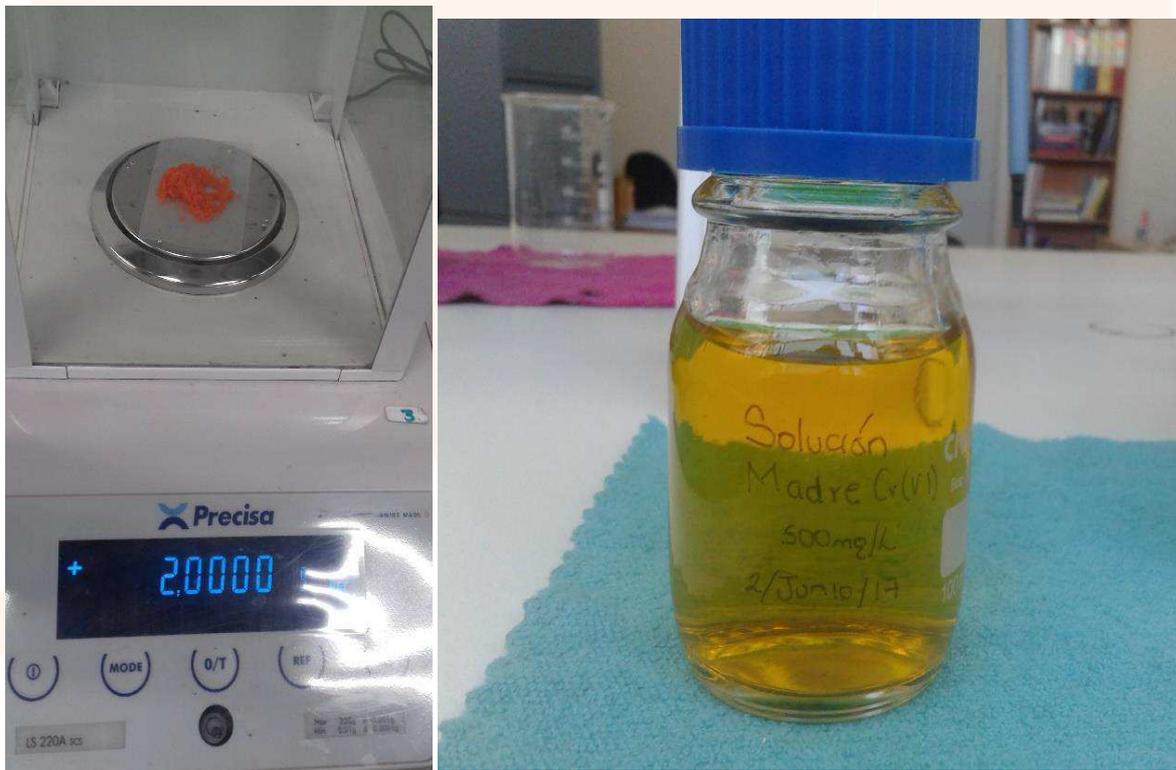


Imagen 12. Solución madre de Cr(VI)

3.2.3. Disolución estándar de Cr (VI) 5 mg/L.

Adicionar una alícuota de 1mL de la disolución madre de cromo (VI) a un matraz volumétrico de 100mL y aforar con agua. 1mL de esta disolución equivale a 5,0 μg de Cr (VI).

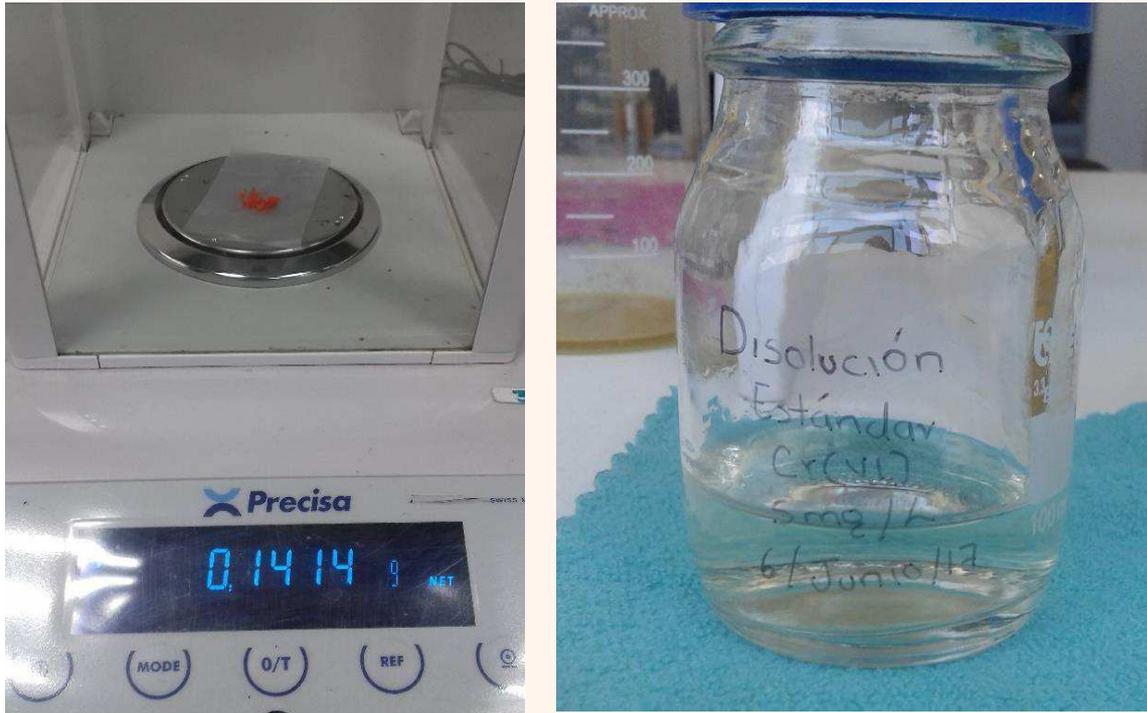


Imagen 13. Solución estándar de Cr(VI)

3.2.4. Disolución de ácido sulfúrico 0.2 N

Agregar 5,6mL de ácido sulfúrico (H_2SO_4) concentrado a un matraz que contenga 500mL de agua, mezcle y deje enfriar a temperatura ambiente. Posteriormente diluya con agua a 1 L.

Se procedió a trabajar con base en la norma correspondiente, siguiendo los parámetros necesarios para la determinación de cromo en cada uno de los ensayos.

MATERIA PRIMA

Las muestras de *Agave potatorum* fueron hojas basales de aproximadamente 8 años de edad.



Imagen 14. Hojas de *Agave potatorum*

La naranja dulce (*Citrus sinensis*) fue obtenida de manera comercial seleccionando las frutas que presentaran color característico, que no presentaran manchas o abolladuras en la cáscara.



Imagen 15. *Citrus sinensis*

ENSAYOS QUÍMICOS

3.3. Obtención de la cáscara de *Citrus sinensis*

Una vez seleccionado la naranja se procedió a su lavado con agua destilada, y se comenzó a retirar la cáscara para su posterior uso en la extracción.

3.3.1. Obtención del extracto de Naranja

Se pesaron 150 gr de cascara de naranja, se colocaron en el cartucho de extracción del equipo Soxhlet y se adicionaron 300mL de etanol absoluto. Se colocó a reflujo con un tiempo de reacción de 3 horas con agitación. Una vez obtenido el extracto se concentró hasta obtener un volumen final de 50mL utilizando vacío a presión reducida (Perez, 2017).



Imagen 16. Extracción de *Citrus sinensis*

3.4.3 Soporte del biofiltro (obtención de la fibra de *Agave potatorum*)

Una vez obtenidas las hojas de *Agave potatorum*, se pesaron 100 gr y se procedió a lavarlas cuidadosamente con agua tridestilada hasta obtener hojas libres de polvo, posteriormente se trituro hasta alcanzar una fase sólido-líquido misma, que fue separada por filtración.



Imagen 17. Obtención del soporte

La fase líquida se almaceno (extracto acuoso) y la fase sólida, es decir la fibra, se deshidrato para su posterior uso en la extracción

Posterior a esto se procedió a un secado para obtener la fibra del agave, la cual sería utilizada como soporte en nuestro biofiltro.



DESARROLLO EXPERIMENTAL

3.5. Tratamiento de la muestra

3.5.1 Desarrollo de color

La muestra problema fue ajustada a $\text{pH} < 2$ con ácido sulfúrico 0.2 N, se tomó una alícuota de 100 ml y se agregan 2 ml de la disolución de difenilcabazida, se mezcla y se deja reposar por 10 min para desarrollar el color completamente.

Se ajusta el espectrofotómetro con el blanco de reactivos a cero de absorbancia y se mide a 540 nm en una celda de cuarzo de 1 cm de las muestras estándares.

3.6. Técnica colorimétrica para cuantificación de Cr(VI)

3.6.1 Curva de calibración

Se midieron volúmenes de disolución estándar de Cr (VI) 5,0 $\mu\text{g/mL}$ entre 2,0mL y 20,0mL. de esta disolución para obtener estándares en el intervalo de 10 ppm a 100 ppm de Cr (VI). Se agregó ácido sulfúrico 0,2 N hasta llegar $\text{pH} < 2$ y se siguió el procedimiento para para el desarrollo de color, posteriormente se midió su absorbancia en el espectro UV-VIS a 540nm.

3.7. Prueba del bagazo

La fase sólida (bagazo de *Agave potatorum*) obtenida se empaqueta en una columna de cromatografía, por la misma se hicieron pasar 50 ml de la solución estándar de cromo hexavalente, una vez recuperados se les dio el tratamiento para el desarrollo de color y se midió su absorbancia.



Imagen 18. Prueba del bagazo

3.8. Prueba del bagazo y extracto de *Citrus sinensis*

En el segundo experimento de igual forma de empaqueto la fibra de *Agave potatorum* y sobre esta se hicieron pasar 100 ml de extracto etanólico de *Citrus sinensis*, se recuperó el exceso y se dejó en reposo hasta secar por completo.

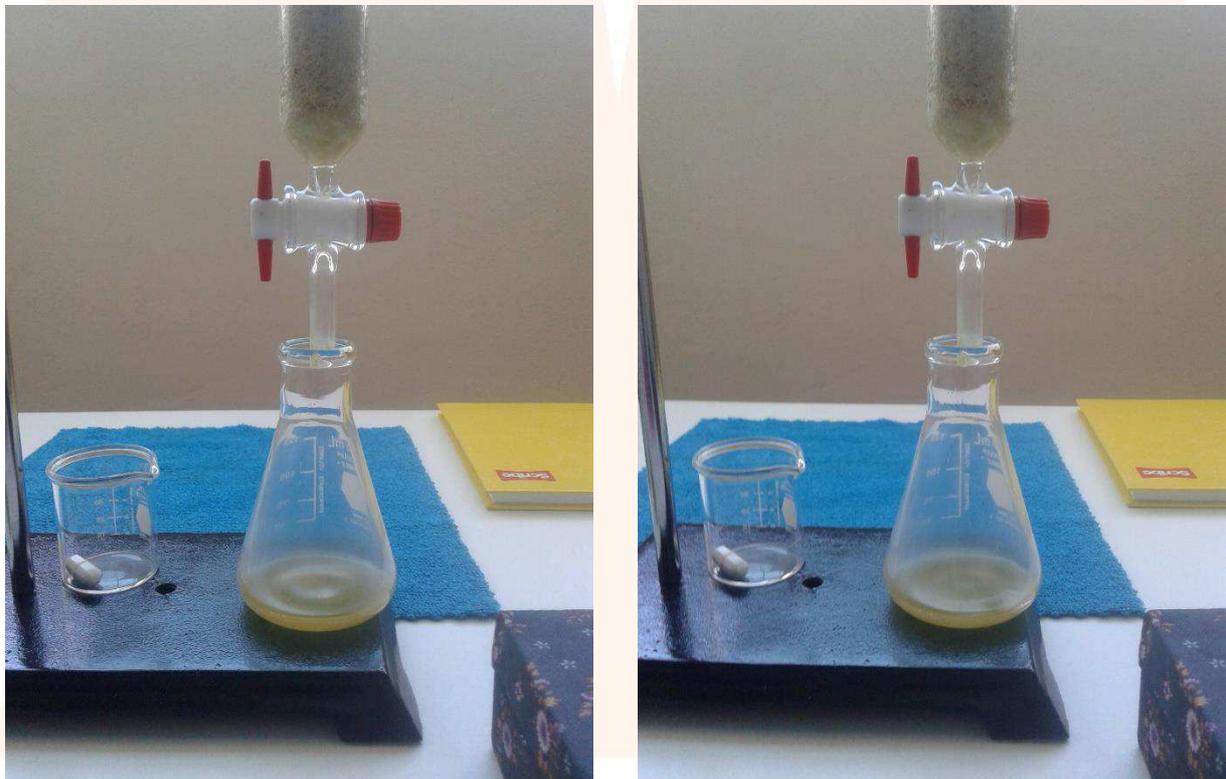


Imagen 19. Prueba del bagazo y extracto de *Citrus sinensis*



3.9. Caracterización fitoquímica de *Agave potatorum*

Una vez obtenidos los extractos se les realizaron las pruebas correspondientes para determinar la presencia de metabolitos presentes.

3.9.1. Técnica de análisis cualitativo

Flavonoides:

5 ml de 1% de ácido clorhídrico es agitado con hidróxido de sodio, un color amarillo indica la presencia de flavonoides.

Fenoles:

1 ml de extracto se le añade 2 ml de agua destilada y unas pocas gotas de FeCl_3 al 10%. La aparición de una coloración azul o verde indica la presencia de fenoles.

Saponinas:

Cuando la muestra está en etanol se diluyen en 5 veces su volumen y se agita la mezcla fuertemente durante 5-10 min. El ensayo se considera positivo cuando aparece espuma en la superficie del líquido de más de 2 mm de espesor o altura y dura aprox. 2 min.

Esteroles y Triterpenos. Liebermann-Burchard:

La muestra se disuelve en cloroformo se adiciona 1 ml de anhídrido acético y se mezcla. Por la pared se agregan 2 gotas de ácido sulfúrico concentrado sin agitar. La prueba es positiva cuando hay formación de colores azul verdoso, verde oscuro, café y/o negro para esteroles y rojo, violeta y morado con triterpenos.



Salkowski:

1 ml de la fracción en cloroformo se coloca en un tubo con 1ml de ácido sulfúrico concentrado. El ensayo es positivo cuando aparece una coloración amarillo-rojiza.

Taninos:

1 gota de FeCl_3 es añadida a 2 ml de extracto. El ensayo es positivo cuando hay una coloración negra azulado.

Carbohidratos:

En un tubo con 5 ml de filtrado es tratado con 5 ml de solución de Fehling's y es calentado; la aparición de un precipitado rojo indica la presencia de azúcares reducidos.

Aceites volátiles:

A 2 ml de extracto se le añaden 0.1 ml de hidróxido de sodio diluido y un poco de ácido clorhídrico diluido. La formación de un precipitado blanco indica aceites volátiles.

Ácidos grasos:

Se toma una alícuota de la fracción en el disolvente de extracción y se le añade 1ml de una solución diluida en agua del colorante Sudán III o Sudán IV. Se calienta en baño de agua hasta evaporación del disolvente. La presencia de compuestos grasos se considera positiva si aparecen gotas o una película coloreada de rojo en el seno del líquido o en las paredes del tubo de ensayo, respectivamente.



3.9.2. Técnica de análisis cuantitativo (curvas para la cuantificación de metabolitos secundarios)

✚ Flavonoides:

Para los reactivos se procedió a pesar 2.5 g de $(AlCl_3)$ y se aforó a 25 ml. 2.45 de Acetato de potasio y aforar a 25 ml. Una solución de quercetina a una concentración de 0.1 mg/ml.

Procedimiento: En tubos se agregaron 100 μ l de las diferentes concentraciones de quercetina, se adicionaron 300 μ l de etanol, 20 μ l de $AlCl_3$ al 10%, 20 μ l acetato de potasio 1M, 560 μ l de agua destilada. Se dejó reposando por 30 minutos a temperatura ambiente.

Se midió su absorbancia a 415 nm utilizando etanol como blanco.

✚ Fenoles totales:

Hidróxido de sodio 0.5N, $CuSO_4$ al 1%, 2 g de Na_2CO_3 en 50 ml de agua destilada y aforar a 100ml, 2.7 g de tartrato de sodio y potasio y aforar a 100 ml. Solución A: mezclar 10 ml de Na_2CO_3 al 2% con 0.1 ml de $CuSO_4$ y 0.1 ml de tartrato de sodio y potasio, reactivo de Folin-Ciocalteu: (diluir en agua destilada en proporción 1:1 v/v). Como estándar se utilizó ácido gálico a una concentración de 1mM.

Procedimiento: Se midieron volúmenes de disolución del estándar y se adicionó 1 ml de solución A, después se adicionaron 0.2 ml de NaOH y se dejó reposar por 10 min a temperatura ambiente, pasado ese tiempo se adicionó 0.1 ml de Folin-ciocalteu a cada tubo y se agitó.

Se dejó reposar por 30 minutos y se midió su absorbancia a 750 nm utilizando agua como blanco.



Polifenoles totales:

Carbonato de sodio al 12%, Reactivo de Folin-ciocalteu al 10%. Una solución estándar de ácido 3mM.

Procedimiento: Se colocó en tubos 250µl de Folin-ciocalteu, 50 µl de las diluciones del estándar, 500µl agua destilada y se dejó en reposo durante 1 minuto, posteriormente se añadió a cada tubo 750µl de Na₂CO₃ al 20%, finalmente se dejó incubar 1 hora en oscuridad a temperatura ambiente.

Se midió su absorbancia a 760 nm utilizando agua como blanco.

Azucares reductores:

Como estándar se utilizó Glucosa.

Procedimiento: Se Agregó en cada tubo 0.125 ml de cada dilución más 0.125 ml de DNS, estos tubos se colocaron baño de agua a 100°C durante 5 minutos. Transcurrido el tiempo se enfrió en baño de hielo durante 5 minutos. Por último, agregaron 1.250 ml de agua destilada.

Su absorbancia se midió a 540 nm, utilizando agua como blanco

Esteroles:

Mezcla de cloroformo metanol proporción 2:1, reactivo de Libermann-Burchard. solución estándar (colesterol 0.4mg/ml). Muestra: 25mg en 5 ml de solución de cloroformo-metanol (2:1). Solución de CaCl₂ saturado. Mezcla de cloroformo-metanol-agua en proporción 2:50:50.

Procedimiento: Las muestras se colocaron a baño maría a 50°C por 10 min. Esta fue filtrada y se le agregaron 0.5ml de CaCl₂ hasta obtener la formación de dos fases. Estas fueron separadas y sólo se utilizó la fase inferior a la cual se le agregó el doble de su volumen de la mezcla de cloroformo-metanol-agua (2:50:50).



Nuevamente se obtuvo la formación de dos fases, y se retiró la fase superior. Se midió el volumen final de la fase inferior. De esta fase se tomaron 0.5ml y se le agregó 5 ml del reactivo de Lieberman. Los tubos se taparon y se colocaron a baño de agua de 35°C por 10 min.

Su absorbancia se midió a 550 nm usando blanco como agua destilada.

Actividad antioxidante (DPPH):

Se preparó una solución de DPPH a 100ppm.

Procedimiento: se tomaron 400µl de cada extracto y 2ml de DPPH que fueron agregadas a cada tubo y se dejaron durante 30 minutos.

Se midieron las absorbancias en tiempo cero y posteriormente a los 30 minutos a 517 nm utilizando como blanco una solución de DPPH-etanol (400 µl y 2 ml de DPPH). Todas las muestras fueron mantenidas en oscuridad y agitación durante el ensayo.

CAPÍTULO IV RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. Curva de calibración

De acuerdo con la normatividad para la determinación de cromo; en tubos se colocaron disoluciones con diferentes concentraciones que fueron desde 10 ppm hasta 100 ppm de cromo hexavalente, estos fueron sometidos a la técnica de desarrollo de color y posteriormente se realizaron las correspondientes lecturas a 540 nm en el espectrofotómetro.

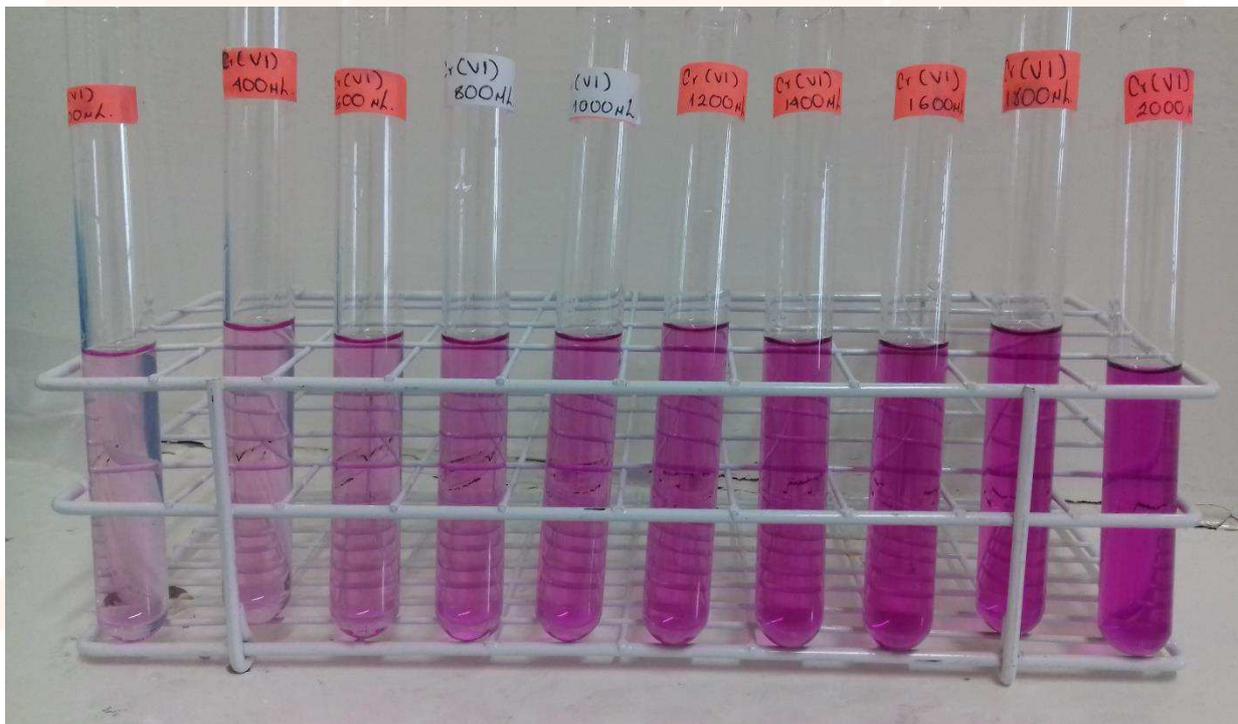
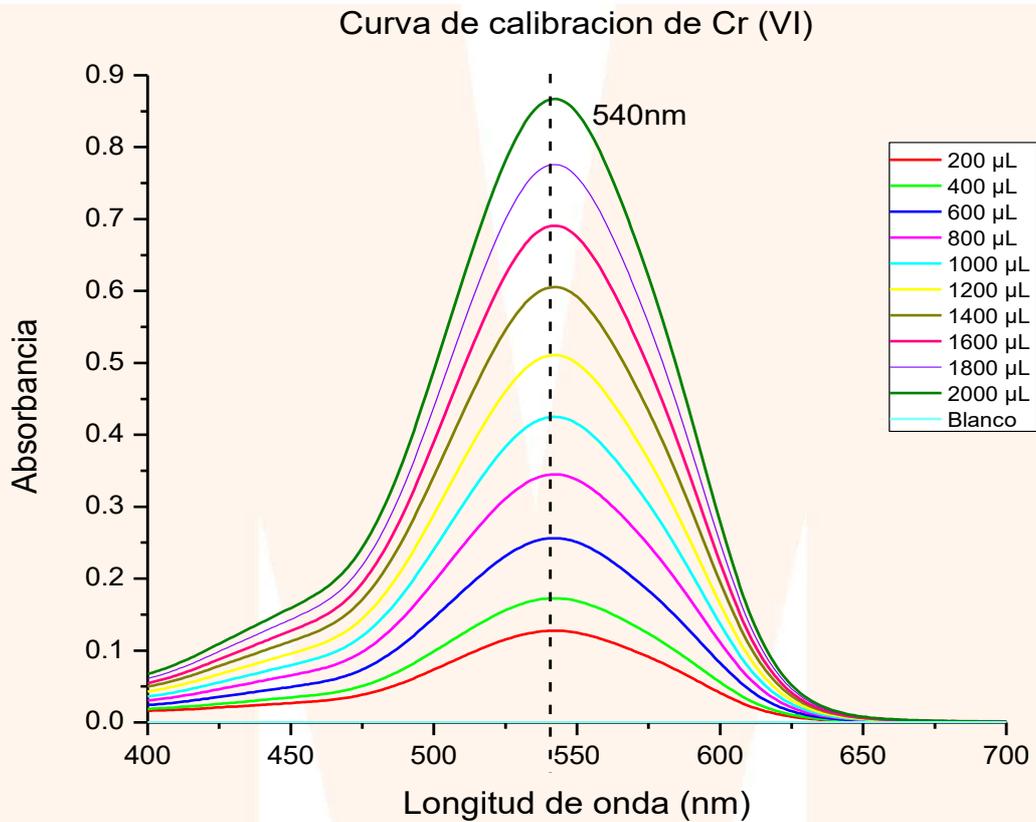
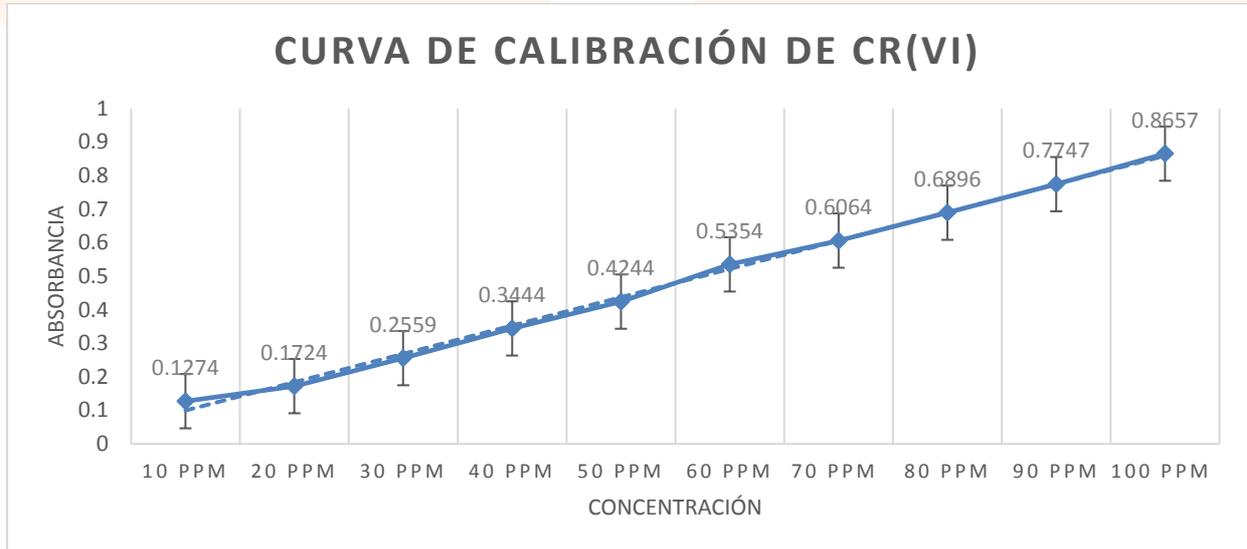


Imagen 20. Muestras para curva de calibración



Esquema 1. Espectro UV-vis - Curva de calibración

Posteriormente se graficó para obtener la curva correspondiente la cual se tomó como referencia para situar nuestra muestra problema y de esta forma a partir de la ley de Lambert-beer calcular la disminución de concentración de cromo hexavalente.

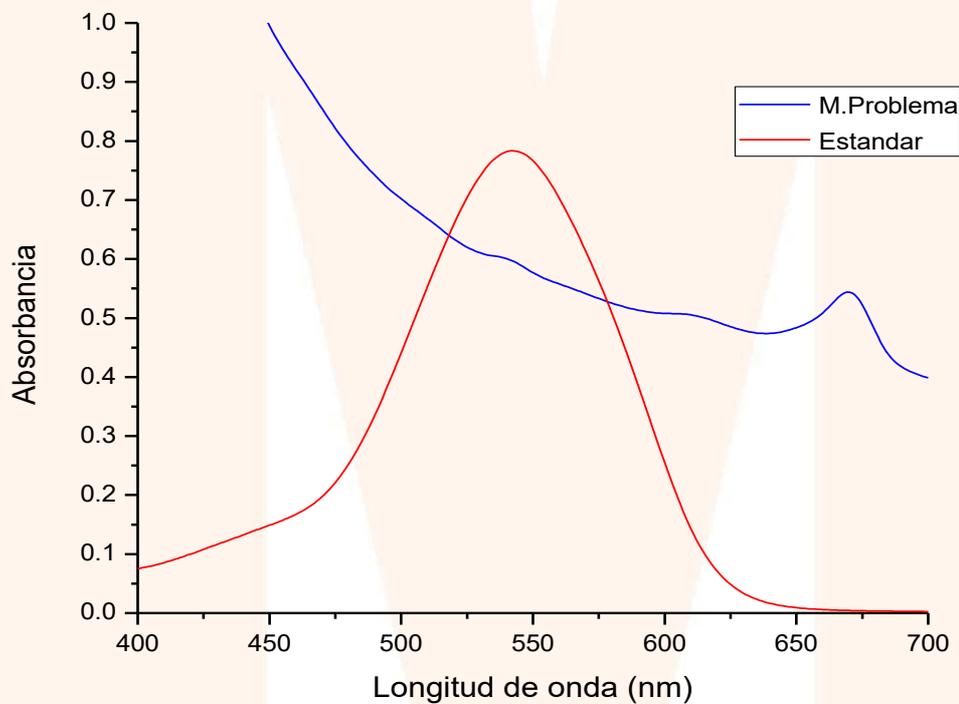


Esquema 2. Grafica de la curva de calibración

Estos resultados nos demuestran que la absorbancia es directamente proporcional a la cantidad de cromo hexavalente presentes en la muestra, así como la intensidad de color.

4.2 Prueba del bagazo

Una vez empaquetada la columna cromatográfica con la fibra seca de *Agave potatorum*, se hicieron pasar 50 ml de la solución estándar de cromo hexavalente. Una vez recuperada se le dio el tratamiento de desarrollo de color y se midió su absorbancia.



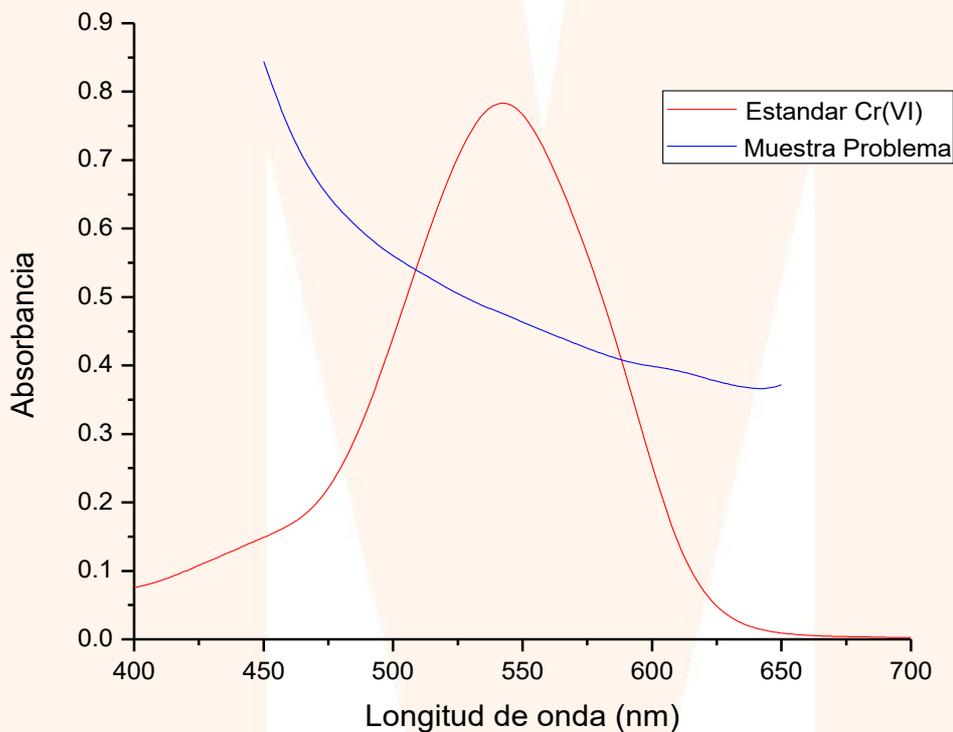
Esquema 3. Espectro UV-vis de la prueba del bagazo

Una vez obtenidos los datos, se realizaron los cálculos correspondientes los cuales nos arrojaron una disminución de 30.4% de cromo hexavalente. Para comprobar la cantidad real de disminución el proceso se modeló a través de regresión lineal obteniendo un porcentaje de disminución de 30.6%.

4.3. Prueba del bagazo y extracto de *Citrus sinensis*

Repitiendo la metodología del ensayo anterior, una vez empaquetada la columna se pasaron 50 ml de extracto etanólico selectivo de *Citrus sinensis*.

De la misma forma se hicieron pasar 50 ml de la solución estándar de cromo hexavalente y se le dio el mismo tratamiento para leer su absorbancia.



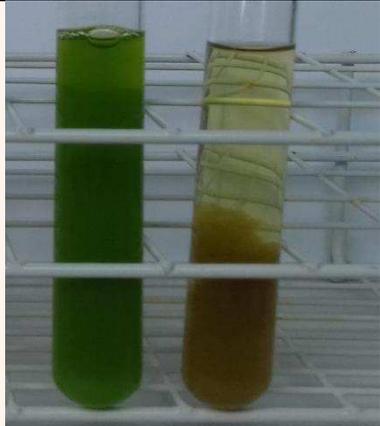
Esquema 4. Espectro UV-vis de la prueba del bagazo y *Citrus sinensis*

Realizados los cálculos correspondientes se obtuvo un 46.2% de disminución de cromo y en el modelo arrojó un 45.08% de disminución corroborando que el proceso está siendo eficiente.

4.4. Técnica de análisis cualitativo

FLAVONOIDES

Positivo: Aparición de una coloración amarilla

FOTO EVIDENCIA	EXTRACTO	RESULTADO
	ACUOSO	POSITIVO
	ETANÓLICO	POSITIVO

Esquema 5. Resultados prueba Flavonoides

FENOLES

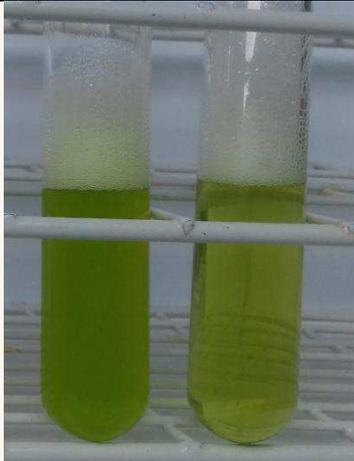
Positivo: Coloración azul o verde

FOTO EVIDENCIA	EXTRACTO	RESULTADO
	ACUOSO	POSITIVO
	ETANÓLICO	POSITIVO

Esquema 6. Resultados prueba Fenoles totales

SAPONINAS

Positivo: Aparece espuma

FOTO EVIDENCIA	EXTRACTO	RESULTADO
	ACUOSO	POSITIVO
	ETANÓLICO	POSITIVO

Esquema 7. Resultados prueba Saponinas

LIEBERMAN BURCHARD

Positivo: Café, azul verdoso, verde oscuro o negro

FOTO EVIDENCIA	EXTRACTO	RESULTADO
	ACUOSO	POSITIVO
	ETANÓLICO	POSITIVO

Esquema 8. Resultados prueba Lieberman Burchard

SALKOWSKI

Positivo: Amarillo rojiza

FOTO EVIDENCIA	EXTRACTO	RESULTADO
	ACUOSO	POSITIVO
	ETANÓLICO	POSITIVO

Esquema 9. Resultados prueba Salkowski

TANINOS

Positivo: Coloración negro azulado o verdoso

FOTO EVIDENCIA	EXTRACTO	RESULTADO
	ACUOSO	POSITIVO
	ETANÓLICO	POSITIVO

Esquema 10. Resultados prueba Taninos

CARBOHIDRATOS
Precipitado rojo

FOTO EVIDENCIA	EXTRACTO	RESULTADO
	ACUOSO	POSITIVO
	ETANÓLICO	POSITIVO
	ACUOSO DILUIDO 1/10	POSITIVO

Esquema 11. Resultados prueba Carbohidratos

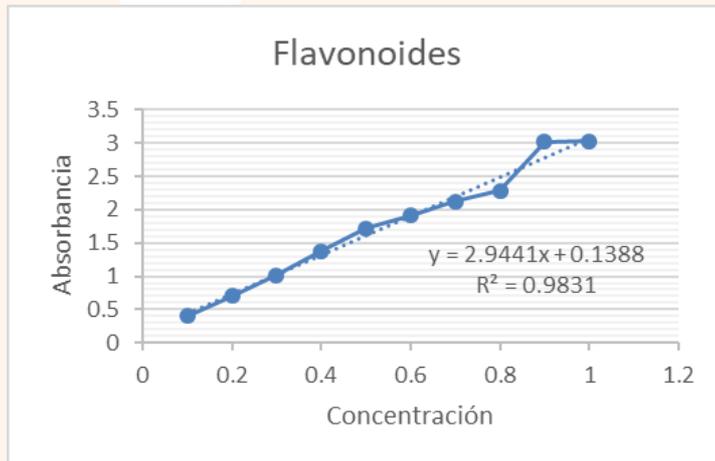
4.5. Técnica de análisis cuantitativo

Se obtuvieron las curvas de calibración correspondientes de cada metabolito de interés, las cuales nos sirvieron como referencias para determinar la cantidad de cada metabolito presente en los extractos.

FLAVONOIDES

Curva de calibración para flavonoides

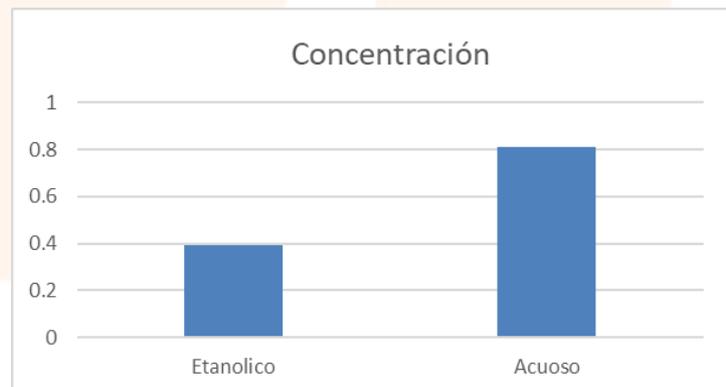
Flavonoides	
Concentración	Absorbancia
0.1	0.4053
0.2	0.6991
0.3	1.0192
0.4	1.3802
0.5	1.7173
0.6	1.9069
0.7	2.1265
0.8	2.2789
0.9	3.0158
1	3.0312



Esquema 12. Curva de calibración flavonoides

En la siguiente grafica se muestra la concentración de flavonoides que contiene cada extracto en el cual se observa que el extracto Acuoso contiene más concentración de flavonoides.

Muestra	Absorbancia	Concentración
Etanólico	1.3593	0.393942907
Acuoso	2.71	0.808740633

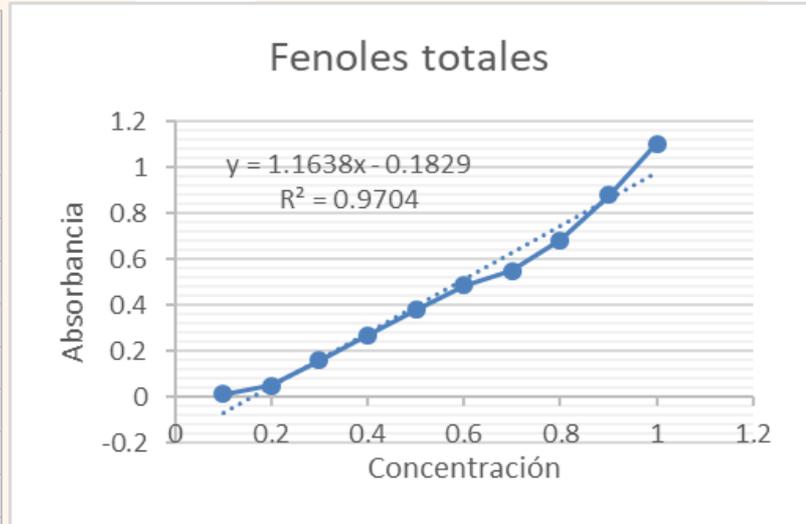


Esquema 13. Concentración de flavonoides en los extractos acuoso y etanólico

FENOLES TOTALES

Curva de calibración de fenoles totales

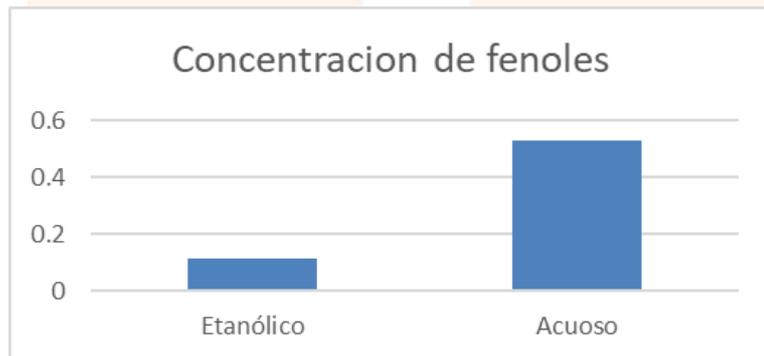
Fenoles Totales	
Concentración	Absorbancia
0.1	0.0134
0.2	0.0497
0.3	0.1586
0.4	0.2678
0.5	0.3797
0.6	0.4845
0.7	0.5505
0.8	0.6828
0.9	0.8809
1	1.1034



Esquema 14. Curva de calibración de fenoles totales

En esta gráfica se muestra la concentración de fenoles totales que contiene cada extracto y nuevamente el extracto acuoso presenta una mayor concentración de fenoles que el etanólico.

Muestra	Concentración
Etanólico	0.115542868
Acuoso	0.529226006

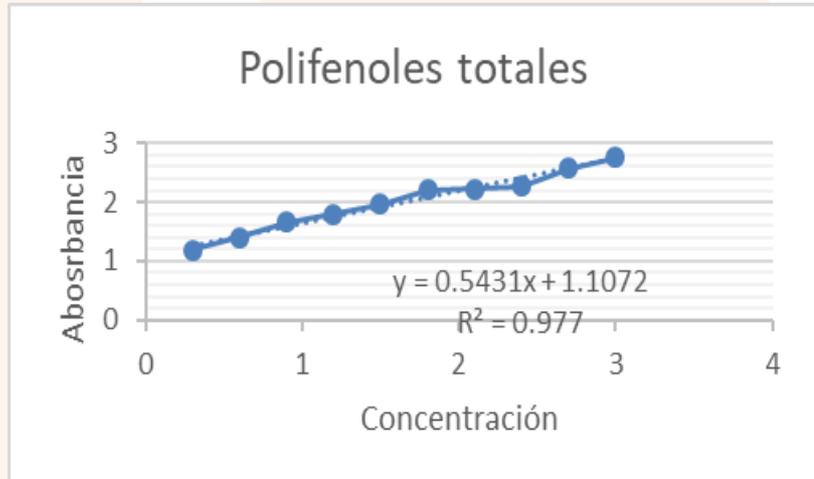


Esquema 15. Concentración de fenoles totales en los extractos acuoso y etanólico

POLIFENOLES

Curva de calibración para polifenoles totales

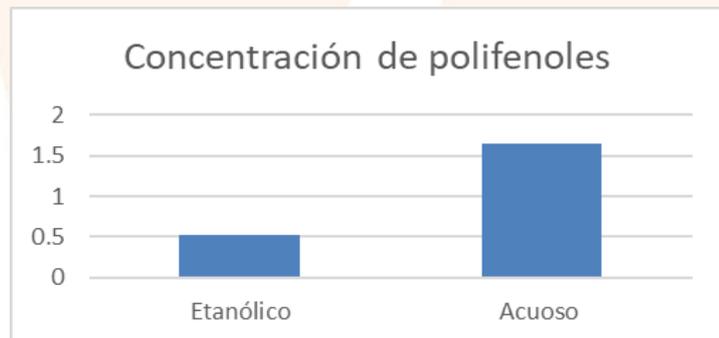
Polifenoles	
Concentración	Absorbancia
0.3	1.1835
0.6	1.3985
0.9	1.6632
1.2	1.8014
1.5	1.9666
1.8	2.2011
2.1	2.2221
2.4	2.2692
2.7	2.5752
3	2.7524



Esquema 16. Curva de calibración polifenoles

En está gráfica se corrobora que el extracto acuoso cuenta con polifenoles totales triplicando la concentración del extracto etanólico.

Muestra	Concentración
Etanólico	0.527107615
Acuoso	1.643682704

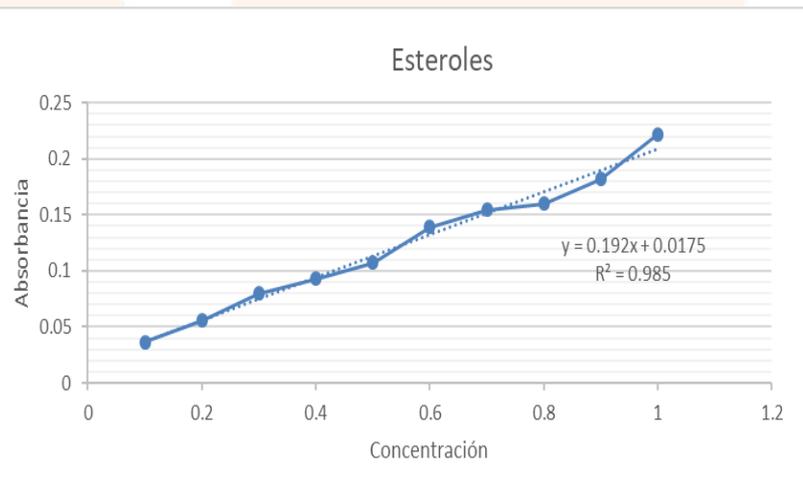


Esquema 17. Concentración de polifenoles en los extractos acuoso y etanólico

ESTEROLES

Curva de calibración para esteroides

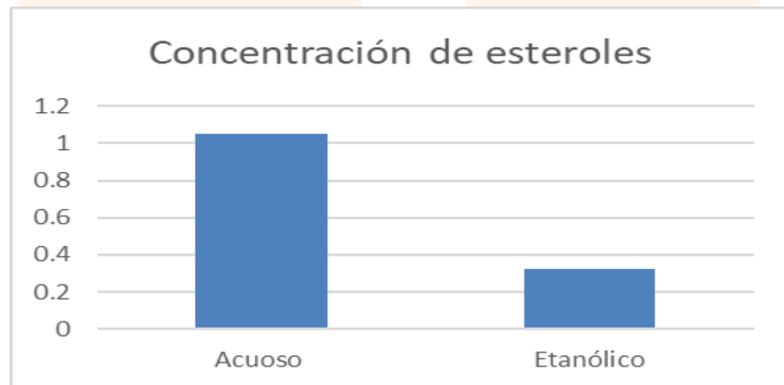
Esteroides	
Concentración	Absorbancia
0.1	0.0367
0.2	0.0558
0.3	0.08
0.4	0.0932
0.5	0.1071
0.6	0.1392
0.7	0.1543
0.8	0.1602
0.9	0.1819
1	0.2221



Esquema 18. Curva de calibración Esteroides

Para esteroides al realizar las pruebas se obtiene que el Extracto acuoso contiene la mayor concentración de este metabolito.

Muestra	Concentración
Acuoso	1.047726249
Etanólico	0.322125

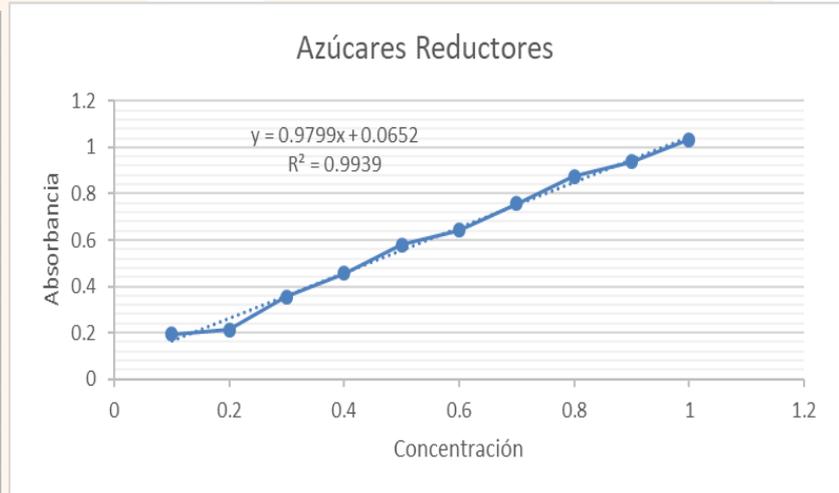


Esquema 19. Concentración de esteroides en los extractos acuoso y etanólico

AZUCARES REDUCTORES

Curva de calibración para azúcares reductores

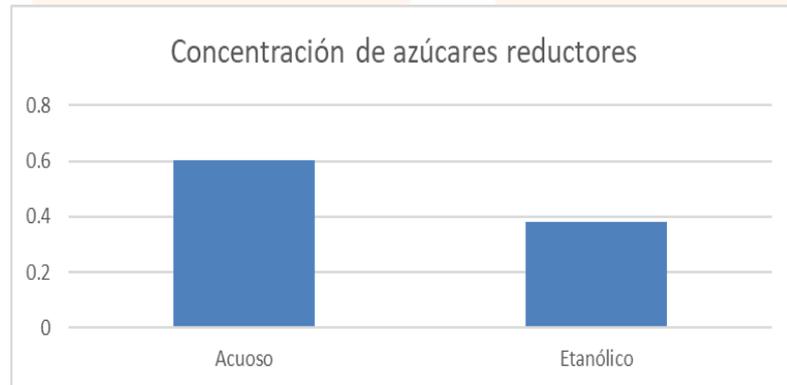
Azúcares Reductores	
Concentración	Absorbancia
0.1	0.1941
0.2	0.214
0.3	0.356
0.4	0.4564
0.5	0.5783
0.6	0.6412
0.7	0.7562
0.8	0.8756
0.9	0.9375
1	1.0322



Esquema 20. Curva de calibración Azúcares reductores

Los datos obtenidos muestran que el extracto acuoso contiene casi el doble de azúcares reductores en comparación con el extracto etanólico.

Muestra	Etanólico
Acuoso	0.600748596
Etanólico	0.38115688



Esquema 21. Concentración de azúcares reductores en los extractos acuoso y etanólico



ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DPPH

Los datos obtenidos mediante ensayo DPPH, se expresan en forma de “Porcentaje de inhibición”, para ello fue necesario utilizar la siguiente formula:

$$\text{Porcentaje de inhibición} = \frac{Abs_M}{Abs_{DPPH}} * 100$$

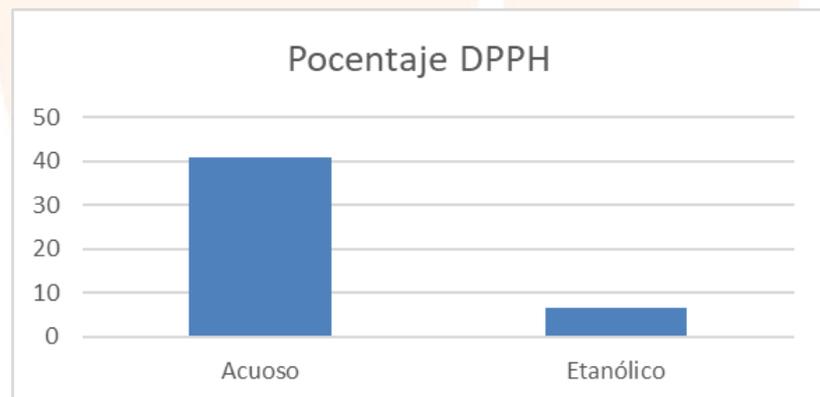
Dónde:

Abs_M= Absorbancia de la muestra

Abs_{DPPH}=Absorbancia de DPPH

El porcentaje de inhibición por prueba de DPPH para el extracto etanólico fue de 6.66% lo que quiere decir que tiene una baja capacidad antioxidante y para el acuoso muestra una alta capacidad antioxidante con un 40%.

Muestra	Porcentaje
Acuoso	40.949255
Etanólico	6.6649836



Esquema 22. Porcentaje de inhibición de DPPH en los extractos acuoso y etanólico



CAPÍTULO V

5.1 Conclusión

El presente estudio nos permitió conocer las partes que conforman este importante biofiltro y evaluar el papel que desempeña cada uno. Este sistema de desarrollo a partir del bagazo de *Agave potatorum* como adsorbente y un extracto etanólico de *Citrus sinensis* como reductor, a través de procesos biotecnológicos reduciendo el cromo tóxico de una forma eco-amigable.

A partir de los análisis realizados obtuvimos que, debido a la gran cantidad de metabolitos presentes en el *Agave potatorum* existe una disminución ya que son estos quienes actúan en la reducción del metal y en sí en el proceso descontaminante de Cr (VI) en aguas modelo. La actividad antioxidante encontrada en los extractos de *Agave potatorum* debe atribuirse a la presencia de flavonoides y otros compuestos fenólicos que contiene.

Se demostró que utilizar la fibra de *Agave potatorum* y el extracto orgánico de la naranja dulce (*Citrus sinensis*), son una solución a la gran problemática de contaminación que existe en las aguas residuales con metales pesados, debido a que ambos componentes son ricos en propiedades benéficas tales como los metabolitos y antioxidantes, los cuales son altamente eficaces para la adsorción de metales pesados.

Al evaluar la actividad reductora de nuestro biofiltro frente al cromo hexavalente en aguas modelo se obtuvo una reducción experimental de 46.2% y al momento de ser modelado este proceso por regresión lineal nos dio un resultado real de 45% en la reducción de cromo hexavalente.

Este sistema convierte al ion tóxico Cr(VI) en iones biocompatibles gracias a que cuenta con un adsorbente orgánico bagazo de (*Agave potatorum*) y el extracto etanólico de la naranja dulce (*Citrus sinensis*) (Perez, 2017).



BIBLIOGRAFÍA

1. Acosta, I. et al. 2010. Remoción de Cromo (VI) en solución acuosa por la biomasa de la cáscara de tamarindo (*Tamarindus indica*). BioTecnología. Vol.14 NO.3. 11-23.
2. Alcántar F.C. (2005). Identificación y cuantificación de metabolitos secundarios en plantas de tabaco (*Nicotiana tabacum*) transformadas con sistemina y prosistemina de jitomate en respuesta a daño mecánico, herbívora con *Manduca sexta* e infestación con mosquita blanca (*Bemisia tabaci*) (tesis de pregrado). Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional. Irapuato, Guanajuato.
3. Alsina D., Nescier, I., Santin, Z. Gariglio, i, N., Cives, H. Propiedades fisicoquímicas de naranjas cultivadas en la zona centro- este de la provincia de Santa Fe. Revista Horticultura Argentina (2012). 31(74), 1851-9342.
4. Arauzo, Mercedes; Rivera, M.; Valladolid, Maria; Noreña, C.; Cedenilla, O. Contaminación por cromo en el agua intersticial, en el agua del cauce y en los sedimentos del río Jarama. (2003). Asociación Española de Limnología.
5. Avello, M. y Suwalsky, M. (2006), *Radicales libres, antioxidantes naturales y mecanismos de protección*. págs. 161-172.
6. Bécares, E (2014) La biotecnología ambiental, ¿la cenicienta de la biotecnología?, *AmbioCiencias* no.12. 1998-3021.
7. Callow, JA., Ford-Lloyd BV. & Newbury, HJ. (1197) *Biotechnology and plant genetic resources: conservation and use*. CAB International, Wallingford, Oxon, UK.
8. Cañizares Villanueva R.O (2000). Bisorción de metales pesados mediante el uso de biomasa microbiana. *Rev. Latinoamericana de Microbiología*. 42,131-

143.





9. Carrión Salazar Blanca Elizabeth. (2016). Definir una técnica para la reducción de cromo hexavalente en solución acuosa mediante la utilización de Musa cavendishii (cáscara de plátano). Escuela Superior Politécnica de Chimborazo. Riobamba.
10. CONAGUA, *Norma Mexicana NMX-AA-044-SCFI- 2014 Análisis de agua, medición de cromo hexavalente en aguas naturales, salinas residuales y residuales tratadas-Método de Prueba*, (2014), 1-28.
11. Corey G. y Galvao L.A.C (1989). *Serie de vigilancia*. Centro panamericano de Ecología Humana y salud, Organización Panamericana de la Salud, Organización Mundial de la Salud.
12. Delgado, M 1998. La calidad y la innovación tecnológica en la biotecnología aplicada a la salud. Dirección y Organización. no 19. 1132-175x.
13. EPA, U. S. (2010). Cromo (VI) en el agua potable. *Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA)*.
14. García Mendoza, Abisaí Josué. (abril, 2010). Revisión taxonómica del complejo *Agave potatorum Zucc. (Agavaceae)*: nuevos taxa y neotipificación. Acta botánica mexicana, 91, 71-93.
15. Gutiérrez, R. L.-A. (2008). Heavy metals in water of the San Pedro River in Chihuahua, Mexico and its potential health risk. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 798-808.
16. (WHO) World Health Organization International standards for drinking-water, Third edition. Geneva (1971).
17. Levina, A. y. (2005). Studies of relevance to the biological activities of chromium. *Coordination Chemistry Reviews*, pp. 281-289.



18. M-García, L. Collantes, H. Castillo, M. Velázquez, M. Castillo, Rev. Med. Vallejana. (2007) vol. 4 Biorremediación de cromo VI de aguas residuales de curtientes por *Pseudomonas sp* y su efecto sobre el ciclo celular de *Allium cepa*.
19. Martínez H. A. Pastrana C.J, Sánchez V.A, Lara R. J, Herrera E. L, Herrera E. A, Martínez de la Vega O. Simpson W. J. (2007) Genómica de *Agave tequilana*: Identificación de genes útiles para la industria tequilera y el desarrollo de usos alternativos del agave.
20. Meléndez Pizarro C.O, Camacho Dávila A.A. (2008). Química verde, la química del nuevo milenio. Aventuras del pensamiento. Facultad de Ciencias Químicas/Universidad Autónoma de Chihuahua.
21. Mohan, D. y. (2006). Review activated carbons and low cost adsorbents for remediation of tri- and hexavalent chromium form water. *Journal of Hazardous Material, B137*, pp. 762-811.
22. Muñoz Juárez M.A. (2009) Determinación de actividad antioxidante de diversas partes del árbol *Nicotiana Glauca*. Facultad de Química, Universidad Autónoma de Querétaro, 1-4.
23. Nuñez A.J. Terapia antioxidante estrés oxidativo y productos antioxidantes, retos y oportunidades. Revista cubana de salud pública. (2011).37, 644-660.
24. OCDE, 2002. Frascati manual: proposed standard practice for surveys on research development, OCDE, París.
25. O. F. Higuera, H. Escalante, D. Laverde. Scientia et Technica 2005 XI (29) 0122-1701 Reducción del Cromo contenido en efluentes líquidos de la industria del cuero mediante un proceso de adsorción-desorción con algas marinas.



26. Perez-Alvarez V. L.; Tovar-Corona A.; Vázquez-Bravo J.J.; Guevara-Villa M.R.G. Biofilter reducer to Cr(VI) for the sanitation of contaminated water. *Revista de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología* (2017). 35,114-119.
27. Reynolds Kelly A. (2002) tratamiento de Aguas residuales en Latinoamérica, Identificación del problema. 12:1-4.
28. Rincón Alicia M, Vásquez A. Marina, Padilla, Fanny. C. (2005) Composición química y compuestos bioactivos de las harinas de cascara de naranja (*Citrus sinensis*), mandarina (*Citrus reticulata*) y toronja (*Citrus paradisi*) cultivadas en Venezuela. 55(3), 305-310.
29. Salvatella Luis. (2016). *Química Verde Fundamentos y aplicaciones*.
30. Sáiz M.J, López, N. (2010) Obtención y aplicación de extractos naturales. Centro Nacional de Tecnología y Seguridad Alimentaria.
31. Sánchez Montero JM (2011) Biotecnología: presente y futuro. *Anales de la Real Academia Nacional de farmacia* no.4.
32. Simón Ernesto. (2008) Los metales pesados en las aguas residuales.
33. Siebe, C. (2013). Normatividad en México para regular concentraciones de metales pesado en aguas. *Foro: La Gestión De Sitios Contaminados Y Residuos En México*; México,DF.: Int J Environ Res Pública Salud . pp. 9-18.
34. Scragg, A 2005. *Environmental Microbiology*. Oxford University Press, Oxford.
35. Xu, Q. *et al.* (2013) The draft genome of sweet orange (*Citrus sinensis*). *Nature Genetics*. 45, 59–66.
36. Zaror, C (2002). *Introducción a la ingeniería ambiental para la industria de procesos*. 2ª edición. Concepción, U. de Concepción.



IX CONGRESO DE CIENCIAS QUÍMICAS,
TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN
IX CONGRESS OF CHEMICAL SCIENCES,
TECHNOLOGY AND INNOVATION

C- BIOTECNOLOGÍA QUÍMICA/ CHEMICAL BIOTECHNOLOGY

Resúmenes /Abstracts

La Habana, 2015

BP-041

BIOMATERIALS FOR EFFLUENTS TREATMENT IMPACTED BY BIOTIC POLLUTANTS

Zamora-Castro J, Leal-Rodríguez A, Hernández-Zárate G, Juárez-Figueroa J L,
Tovar-Corona A, Guevara-Villa M R, Juárez-Lucero J J

Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla. Calle Popocatepetl s/n, Col. Tres Cerritos, Puebla, Pue. Tel. 01 (222) 5825 222. *Email: galdyhz@gmail.com

Wastewater represents a sanitation risk to human health, and therefore must be adequately treated in order to reduce the amount of potentially pathogenic bacteria in it. The aim of the present study was to assess the potential of dried cactus cladodes biomass, sawdust-activated carbon and hydroxyapatite from eggshells as practical, low cost and eco-friendly biosorbents for the biosorption of fecal coliform bacteria (FCB). A glass bioreactor packed with by-products was made for wastewater treatment. In order to evaluate the effect of water flow rate on the biomaterials' efficiency to remove FCB, two types of flow were used: 2.5 ± 0.2 (T1) and 5.0 ± 0.3 mL min⁻¹ (T2). Both treatments (flows) showed high removal efficiencies of FCB in a short retention time (1.5 h): 88% and 86.7%, respectively. The biomaterial was characterized by Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) obtaining characteristic bands for functional groups of flavonoids, which have reported antimicrobial activity. Cactus fiber characterization was performed via Scanning Electron Microscopy (SEM) finding micropores that present spheric geometry with elongated spaces from 0.720 to 11.933 μm of diameter. This is an important advantage of the biomaterial for attaching bacteria, due to its high surface area that increases its absorption capacity. Results suggest that the by-products tested can be used as effective natural biosorbents for the economic treatment of wastewater containing FCB, compared with conventional techniques.



UPPue

Universidad Politécnica de Puebla



SEGUNDO CONGRESO

DE BIOTECNOLOGÍA DIVERSA

MEMORIAS 2017

Caracterización fitoquímica de *Agave potatorum* para la elaboración de un biofiltro
Pérez-Álvarez Vashti. L., Romero Blázquez M. Fernanda, Sánchez Flores Josué, Bravo Nieves Ariana,
Tovar-Corona Alejandra*

Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla. C. Popocatepetl s/n Col. Tres cerritos, Puebla, Pue. C.P. 72480.

*alejandra.tovar@metropoli.edu.mx

Resumen

Con el fin de reducir el cromo hexavalente (metal altamente móvil, tóxico, carcinógeno, mutagénico y principal contaminante en aguas residuales), nuestro grupo de trabajo desarrolló un sistema bioreductor, a través de un biofiltro compuesto, entre otras cosas, por fibra de *Agave potatorum* (utilizada como soporte), con excelentes resultados en la reducción y adsorción del contaminante (1). Debido a ello, en una segunda etapa del proyecto, nos resulta de suma importancia conocer los metabolitos secundarios presentes en la fibra de agave y de esta manera sugerir el mecanismo de cómo estas moléculas coadyuvan en el proceso descontaminante. Para ello se ha realizado un estudio fitoquímico cualitativo y cuantitativo de dicha fibra. En el presente trabajo se reportan los resultados preliminares, realizados por pruebas bioquímicas colorimétricas de medición por espectrofotometría UV-Visible (cuantitativos), así como análisis sensoriales (cualitativos) que nos permitan conocer las biomoléculas presentes en la misma.

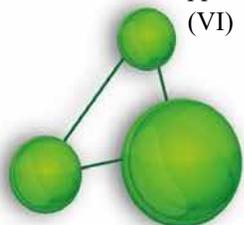
Palabras clave: *Biofiltro, Cromo hexavalente, Agave potatorum, metabolitos, Aguas residuales.*

Introducción

Las aguas residuales son materiales derivados de la actividad industrial y de los residuos domésticos, los cuales por razones de salud pública no pueden ser vertidos a los cursos de aguas corrientes o lagos. A pesar de las recomendaciones y ordenanzas en los últimos años los ambientes naturales han recibido un creciente aporte de efluentes de estas descargas que han llevado al deterioro de muchos cursos de agua haciéndolos incompatibles con la vida (2, 3). Los efluentes industriales que contienen materia orgánica, sulfuros y cromo trivalente son descargados por industrias químicas, de construcción de maquinarias e instrumentos, de radio electrónica, curtiembres, efluentes de torres refrigerantes de estaciones generadoras de energía eléctrica, entre otras (3). El cromo trivalente no es de gran toxicidad, pero bajo cierta condición del medio se oxida, transformándose en un elemento más peligroso denominado cromo hexavalente (4). La concentración de Cr (VI) en aguas residuales que se vierten al ambiente varía de docenas a cientos de metros cúbicos por hora. Aun cuando internacionalmente las Concentraciones Máximas permitidas (MAC) en el ambiente son 0,1 ppm de Cr (VI) y 0,5 ppm de Cr (III) (3). El cromo (VI) es altamente móvil, tóxico a través de la

exposición oral o dérmica y además un carcinógeno conocido. En contraste el cromo (III), es altamente inmóvil y aproximadamente 10-100 veces menos tóxico (5).

Los efluentes de la industria del cuero alcanzan concentraciones de cromo trivalente hasta de 450 ppm, superando las disposiciones de la Organización Mundial de la Salud para aguas de consumo, que especifica un máximo de 1 ppm (6). En las aguas residuales, el Cr (VI), se encuentra en solución como CrO_4^{2-} , este puede removerse por reducción, por precipitación química, por adsorción y por intercambio iónico. (7). En este sentido el uso de reductores y la síntesis química de ligantes presenta una nueva alternativa que no sólo disminuirá el impacto que dicho metal tiene tanto en la salud como en el medio ambiente si no también se tendrá una mejora en el procesamiento de aguas residuales contaminadas con Cr (VI). En el presente trabajo se presentan los resultados preliminares de las pruebas bioquímicas colorimétricas cualitativas y cuantitativas de los metabolitos presentes en el *Agave potatorum*, en esta segunda parte del proyecto es de gran importancia conocer la forma en que estas biomoléculas interactúan en el proceso descontaminante realizado en la primera parte del proyecto.



Metodología

1. Técnica colorimétrica para cuantificación de cromo hexavalente.

250 mg de difenilcarbazida se disolvieron en 50 mL de acetona. 141,4 mg de dicromato de potasio seco fue disuelto con agua y se aforó a 100mL. Un mililitro de esta disolución es equivalente a 500,0 µg de Cr (VI). Se adicionó una alícuota de 1 mL de la disolución madre de cromo (VI) a un matraz volumétrico de 100 mL y se aforó con agua destilada. 1 mL de esta disolución equivale a 5,0 µg de Cr (VI). La muestra problema fue ajustada a pH<2 con ácido sulfúrico 0.2 N, se tomó una alícuota de 100 ml y se agregan 2 ml de la disolución de difenilcarbazida, se mezcla y se deja reposar por 10 min para desarrollar el color completamente.

2. Curva de calibración.

Se midieron volúmenes de disolución estándar de Cr (VI) 5,0 µg/mL entre 2,0 mL y 20,0 mL. de esta disolución para obtener estándares en el intervalo de 10 ppm a 100 ppm de Cr (VI). Se agregó ácido sulfúrico 0,2 N hasta llegar pH<2 y se siguió el procedimiento para para el desarrollo de color, posteriormente se midió su absorbancia en el espectro UV-VIS a 540nm.

3. Desarrollo de biofiltro a partir de bagazo de *Agave potatorum*.

El material vegetal utilizado para el experimento fue obtenido de hojas basales de *Agave potatorum* de aproximadamente 8 años de edad. Se realizó un proceso de limpieza con agua destilada, fueron trituradas hasta llegar a una fase sólido-líquido y posteriormente separadas por filtración, la fase sólida (fibra) se deshidrató por convección natural para su posterior uso en la extracción, la fase líquida obtenida fue el extracto acuoso completo.

Una vez seca la fibra se procedió a realizar una segunda extracción con disolventes de baja y mediana polaridad (Hexano, Acetato de Etilo y Acetona) para utilizar los metabolitos en otros experimentos. El sólido resultante (conteniendo los metabolitos polares solubles en etanol y agua) fue secado y soportada en una columna de vidrio de 25mL de altura y un diámetro de 30mm. Una vez empaquetada, se le hizo pasar una solución estándar de 100ppm de Cr(VI) misma que fue recuperada y a la cual se le midió su absorbancia mediante espectroscopia UV-Vis. Posterior a esto se calculó la concentración de Cr (VI) resultante, en función de la curva obtenida en el punto 2.1, para medir el porcentaje de adsorción de este material sobre el cromo hexavalente.

4. Técnica de análisis cualitativo.

Flavonoides. 5 ml de 1% de ácido clorhídrico es agitado con hidróxido de sodio, un color amarillo indica la presencia de flavonoides.

Fenoles. 1 ml de extracto se le añade 2 ml de agua destilada y unas pocas gotas de FeCl₃ al 10%. La aparición de una coloración azul o verde indica la presencia de fenoles.

Saponinas. Cuando la muestra está en etanol se diluyen en 5 veces su volumen y se agita la mezcla fuertemente durante 5-10 min. El ensayo se considera positivo cuando aparece espuma en la superficie del líquido de más de 2 mm de espesor o altura y dura aprox.2 min.

Esteroles y Triterpenos. Liebermann-Burchard. La muestra se disuelve en cloroformo se adiciona 1 ml de anhídrido acético y se mezcla. Por la pared se agregan 2 gotas de ácido sulfúrico concentrado sin agitar. La prueba es positiva cuando hay formación de colores azul verdoso, verde oscuro, café y/o negro para esteroles y rojo, violeta y morado con triterpenos.

Salkowski. 1 ml de la fracción en cloroformo se coloca en un tubo con 1ml de ácido sulfúrico concentrado. El ensayo es positivo cuando aparece una coloración amarillo-rojiza.

Taninos: 1 gota de FeCl₃ es añadida a 2 ml de extracto. El ensayo es positivo cuando hay una coloración negra azulado.

Carbohidratos. En un tubo con 5 ml de filtrado es tratado con 5 ml de solución de Fehling's y es calentado; la aparición de un precipitado rojo indica la presencia de azúcares reducidos.

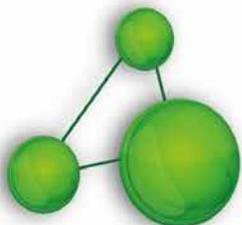
Aceites volátiles. A 2 ml de extracto se le añaden 0.1 ml de hidróxido de sodio diluido y un poco de ácido clorhídrico diluido. La formación de un precipitado blanco indica aceites volátiles.

Ácidos grasos. Se toma una alícuota de la fracción en el disolvente de extracción y se le añade 1ml de una solución diluida en agua del colorante Sudán III o Sudán IV. Se calienta en baño de agua hasta evaporación del disolvente. La presencia de compuestos grasos se considera positiva si aparecen gotas o una película coloreada de rojo en el seno del líquido o en las paredes del tubo de ensayo, respectivamente.

5. Pruebas cuantitativas (Curvas para la cuantificación de metabolitos secundarios).

Flavonoides. Para los reactivos se procedió a pesar 2.5 g de (AlCl₃) y se aforó a 25 ml. 2.45 de Acetato de potasio y aforar a 25 ml. Una solución de quercetina a una concentración de 0.1mg/ml.

En tubos se agregaron 100 µl de las diferentes concentraciones de quercetina, se adicionaron 300 µl de etanol, 20 µl de AlCl₃ al 10%, 20 µl acetato de



potasio 1M, 560 μ l de agua destilada. Se dejó reposando por 30 minutos a temperatura ambiente y se midió su absorbancia a 415 nm utilizando etanol como blanco.

Fenoles totales. Hidróxido de sodio 0.5N, CuSO_4 al 1%, 2 g de NaCO_3 en 50 ml de agua destilada y aforar a 100ml, 2.7 g de tartrato de sodio y potasio y aforar a 100 ml. Solución A: mezclar 10 ml de Na_2CO_3 al 2% con 0.1 ml de CuSO_4 y 0.1 ml de tartrato de sodio y potasio, reactivo de Folin-Ciocalteu: (diluir en agua destilada en proporción 1:1 v/v). Como estándar se utilizó ácido gálico a una concentración 1mM.

Se midieron volúmenes de disolución del estándar y se adicionó 1 ml de solución A, después se adicionaron 0.2 ml de NaOH y se dejó reposar por 10 min a temperatura ambiente, pasado ese tiempo se adicionó 0.1 ml de Folin-ciocalteu a cada tubo y se agitó. Se dejó reposar por 30 minutos y se midió su absorbancia a 750 nm utilizando agua como blanco.

Polifenoles totales. Carbonato de sodio al 12%, Reactivo de Folin-ciocalteu al 10%. Una solución estándar de ácido 3mM. Se colocó en tubos 250 μ l de Folin-ciocalteu, 50 μ l de las diluciones del estándar, 500 μ l agua destilada y se dejó en reposo durante 1 minuto, posteriormente se añadió a cada tubo 750 μ l de Na_2CO_3 al 20%, finalmente se dejó incubar 1 hora en oscuridad a temperatura ambiente y se midió su absorbancia a 760 nm utilizando agua como blanco.

Azúcares reductores. Como estándar se utilizó Glucosa.

Se Agregó en cada tubo 0.125 ml de cada dilución más 0.125 ml de DNS, estos tubos se colocaron baño de agua a 100°C durante 5 minutos. Transcurrido el tiempo se enfrió en baño de hielo durante 5 minutos. Por último, agregaron 1.250 ml de agua destilada. Su absorbancia se midió a 540 nm, utilizando agua como blanco.

Esteroles. Mezcla de cloroformo metanol proporción 2:1, reactivo de Libermann-Burchard. solución estándar (colesterol 0.4mg/ml). Muestra: 25mg en 5 ml de solución de cloroformo-metanol (2:1). Solución de CaCl_2 saturado. Mezcla de cloroformo-metanol-agua en proporción 2:50:50. Las muestras se colocaron a baño maría a 50°C por 10 min. Esta fue filtrada y se le agregaron 0.5ml de CaCl_2 hasta obtener la formación de dos fases. Estas fueron separadas y sólo se utilizó la fase inferior a la cual se le agregó el doble de su volumen de la mezcla de cloroformo-metanol-agua (2:50:50). Nuevamente se obtuvo la formación de dos fases, y se retiró la fase superior. Se midió el volumen final de la fase inferior. De esta fase se tomaron 0.5ml y se le agregó 5 ml del reactivo de Lieberman. Los tubos se taparon y se colocaron a baño de agua de 35°C por 10 min. Su

absorbancia se midió a 550 nm usando blanco como agua destilada.

Actividad antioxidante (DPPH). Se preparó una solución de DPPH a 100ppm. Posteriormente se tomaron 400 μ l de cada extracto y 2ml de DPPH que fueron agregadas a cada tubo y se dejaron durante 30 minutos. Se midieron las absorbancias en tiempo cero y posteriormente a los 30 minutos a 517 nm utilizando como blanco una solución de DPPH-etanol (400 μ l y 2 ml de DPPH). Todas las muestras fueron mantenidas en oscuridad y agitación durante el ensayo.

Resultados y discusión

Curva de calibración de Cromo hexavalente.

En tubos se colocaron disoluciones con diferentes concentraciones que fueron desde 10 ppm hasta 100 ppm de dicho metal, estos fueron sometidos a la técnica de desarrollo de color y posteriormente se realizaron las correspondientes lecturas a 540 nm en el espectrofotómetro (8).

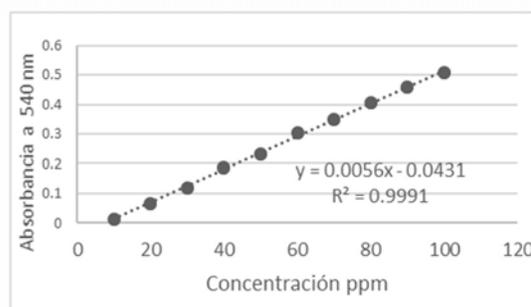


Figura 1. Curva de calibración A540 nm

Prueba del bagazo.

Una vez empaquetaba la columna, se hizo pasar una solución estándar de Cr (VI), esta solución fue recuperada y se midió su absorbancia. En la cual se observó una disminución de Cromo en un 31% misma que se calculó usando:

$$\%Disminución = C_i - \frac{(Abs_{MP})(C_E)}{Abs_{CE}}$$

Dónde:

C_i = concentración inicial

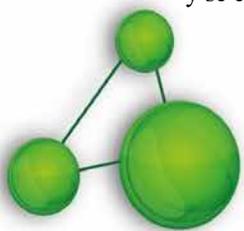
Abs_{MP} = Absorbancia de la muestra problema

C_e = Concentración del estándar

Abs_{CE} = Absorbancia de la concentración del estándar

Análisis cualitativo del extracto etanólico.

A partir de los extractos etanólico y acuoso de la fibra de *Agave potatorum* se realizaron las pruebas cualitativas para evaluar la presencia de los metabolitos existentes en cada muestra. En el cuadro 1 se muestra los metabolitos presentes en el extracto obtenidos



Cuadro 1. Resultados del análisis cualitativo

Prueba	Extractos	Etanólico
Flavonoides		+
Fenoles		+
Saponinas		+
Salkowski		+
Liebermann-Burchard	Esteroles	+
	Triterpenos	-
Carbohidratos		+
Aceites volátiles		-

Análisis cuantitativo

Se realizaron curvas de calibración, mismas que fueron utilizadas como referencia para determinar la cantidad de metabolitos presentes en nuestra muestra. Cada ensayo se realizó por triplicado aplicando el mismo tratamiento del estándar al extracto y para obtener los datos de la concentración se utilizó el método de mínimos cuadrados, se hizo una interpolación de los valores obtenidos por la muestra y se calculó la concentración.

Cuadro 2. Concentración de cada metabolito presentes en el extracto etanólico

Extracto	Prueba	Concentración
Etanólico	Flavonoides	0.39mM
	Fenoles	0.11mM
	Polifenoles	0.52mM
	Esteroles	0.32mM
	Azúcares reductores	0.38mM

Los datos obtenidos mediante ensayo DPPH, se expresan en forma de “Porcentaje de inhibición”, para ello fue necesario utilizar la siguiente formula:

$$\text{Porcentaje de inhibición} = \frac{Abs_M}{Abs_{DPPH}} * 100$$

Dónde:

Abs_M= Absorbancia de la muestra

Abs_{DPPH}=Absorbancia de DPPH

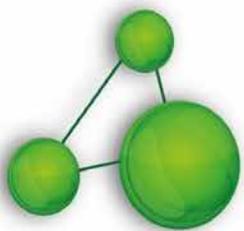
El porcentaje de inhibición por prueba de DPPH para el extracto etanólico fue de 6.66% lo que quiere decir que tiene una baja capacidad antioxidante.

Conclusión

Es debido a la gran cantidad de metabolitos presentes en el *Agave potatorum* que existe una disminución ya que son estos quienes actúan en la reducción del metal y en sí en el proceso descontaminante de Cr (VI) en aguas residuales. Si bien no lo retiran por completo, aportan una parte esencial al proyecto. El análisis del extracto obtenido del bagazo de *Agave potatorum* permitió conocer los metabolitos que componen a esta especie y que sin duda ayudan a la adsorción de Cromo hexavalente. En resultados posteriores se evaluarán a los demás componentes que constituyen el biofiltro.

Referencias

- 1.V.L. Perez, A. Tovar, J. J. Vázquez, M. Guevara. Biofiltro reductor de Cr(VI) para el saneamiento de aguas contaminadas. SIMPOSIO NACIONAL DE INGENIERIA QUIMICA Y BIOQUIMICA APLICADA (Artículo Enviado).
- 2.Ismael-Acosta, Viviana López, Elida Coronado, J. F. Cárdenas, V. M. Martínez, Bio Tecnología (2010) Remocion de Cromo (VI) en Solucion Acuosa por la biomasa de la cáscara de Tamarindo (*Tamarindus indica*).
- 3.M-García, L. Collantes, H. Castillo, M. Velázquez, M. Castillo, Rev. Med. Vallejiana. (2007) vol. 4 Biorremediación de cromo VI de aguas residuales de curtiembres por *Pseudomonas sp* y su efecto sobre el ciclo celular de *Allium cepa*.
- 4.O. F. Higuera, H. Escalante, D. Laverde. Scientia et Technica 2005 XI (29) 0122-1701 Reducción del Cromo contenido en efluentes líquidos de la industria del cuero mediante un proceso de adsorción-desorción con algas marinas.
- 5.A. Villalobos, A. S. Ellis, M.A. Armienta, O. Morton, T. M. Johnson Applied Geochemistry (2012), 1783-1794. Geochemistry and Cr stable isotopes of Cr-contaminated groundwater in Leon, Valley, Guanajuato, Mexico.
- 6.International standards for drinking-water, Third edition, World health organization. Geneva (1971)
- 7.J. F. Cárdenas, I. Acosta Información Tecnológica (2011) vol.22(1) 0718-0764 Remoción de Cromo Hexavalente por el hongo *Paecilomyces sp*. Aislado del medio ambiente.
8. CONAGUA, Norma Mexicana NMX-AA-044-SCFI-2014 Análisis de agua, medición de cromo hexavalente en aguas naturales, salinas residuales y residuales tratadas-Método de Prueba, (2014), 1-28.





IX CONGRESO DE CIENCIAS QUÍMICAS,
TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN

IX CONGRESS OF CHEMICAL SCIENCES,
TECHNOLOGY AND INNOVATION

G- QUÍMICA AMBIENTAL/ ENVIRONMENTAL CHEMISTRY

Resúmenes/Abstracts

La Habana, 2015

GO-011

SÍNTESIS DE LIGANTES POLIDENTADOS Y SU APLICACIÓN EN EL TRATAMIENTO DE AGUAS CONTAMINADAS CON Cr(VI)

Tovar-Corona A¹, Vázquez-Bravo J J², Vázquez-Cuchillo O³, Palafox-Zamora L J², López Pérez J²

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias Químicas.
Puebla, México alejandra.tovar@correo.buap.mx

²Universidad Politécnica Metropolitana de Puebla, Ingeniería en Biotecnología. México

³Instituto Tecnológico de Puebla, Departamento de Posgrado e Investigación. México

Se desarrolló un sistema absorbente de cromo (VI), sintetizado por química verde, a partir de la condensación nucleofílica del cinamaldehído, aceite esencial de la canela (*Cinnamomum aromaticum*) y las poliaminas primarias Dietilentriamina y la Tris (2-aminoetil) amina, generando ligantes polidentados de tipo base de Schiff. Los cuales se caracterizaron por espectroscopia de rutina (RMN, FT-IR y IE) y se evaluó su actividad quelante frente a Cr(VI) en aguas modelo, siguiéndolo por espectrofotometría UV-Vis y absorción atómica (AA), obteniéndose una efectividad del 90 al 96% en la remoción de dicho metal. Los resultados confirman que una de las formas más eficientes de atrapar cromo (VI) es a través de ligantes orgánicos que permitan “anclar” al metal por medio de especies donadoras de electrones, formando en consecuencia complejos metálicos, estables y de fácil remoción; para su posterior uso en el tratamiento de efluentes de diferentes industrias como es la metal mecánica o mineras, representando una operación de bajo costo, altamente efectiva y sustentablemente viable. Se concluye que el uso de ligantes orgánicos derivado de la canela (*Cinnamomum aromaticum*) representa una alternativa de bajo costo, altamente efectiva y viable sustentablemente para el tratamiento de efluentes industriales y/o mineros contaminados con Cr(VI).