

Historia de la Química

Abril de 2021

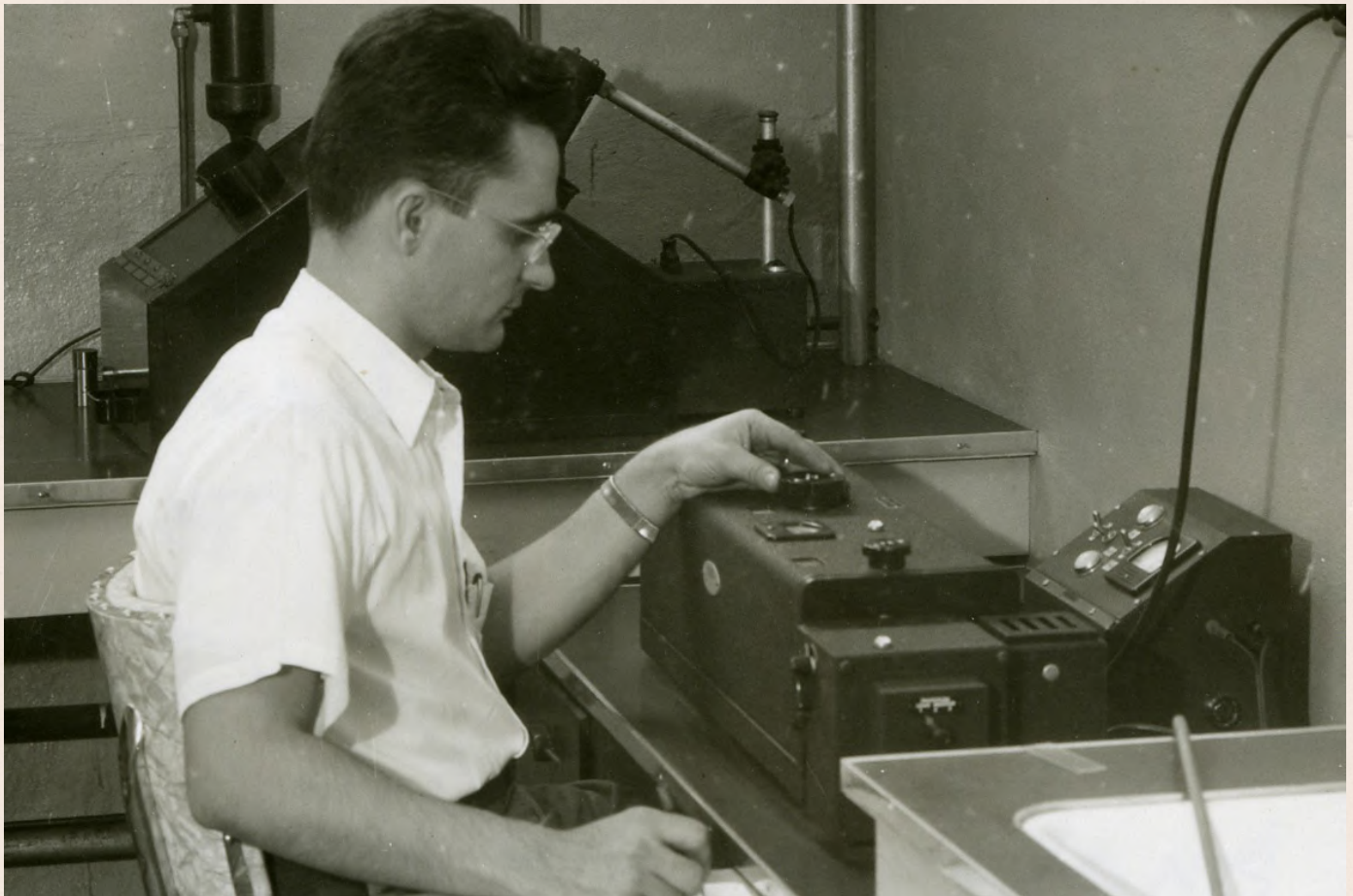
Bachillerato de Química Industrial

LA ESPECTROSCOPIA Y LOS ESPECTROFOTÓMETROS

Un poco de historia

El término espectroscopia hace referencia a la observación y al estudio del espectro, y se basa en la interacción de la energía radiante con la materia. Esta interacción es tan específica que nos permite identificar el tipo y la cantidad de materia que interactuó. Es decir, los métodos espectroscópicos nos permiten realizar análisis cualitativos

y cuantitativos; desde descubrir y explicar la composición de la materia de objetos tan lejanos como las estrellas, hasta la composición de muestras tanto orgánicas, inorgánicas o de análisis elemental. Y es el fundamento de primera línea en los laboratorios de análisis del área de la salud y de la industria.





“Probablemente el instrumento más importante jamás desarrollado para el avance de la biociencia”.

La contribución del espectrofotómetro a la química ha sido tan grande que Bruce Merrifield, ganador del premio Nobel de Química en 1984, lo consideró como “probablemente el instrumento más importante jamás desarrollado para el avance de la biociencia”.

¿Qué es la espectroscopía?

La espectroscopía es la herramienta más utilizada en investigación, análisis, control y diagnóstico en muchos ámbitos relacionados con la física, la química, las ciencias biológicas y las ciencias médicas.

¿Qué es un espectrofotómetro?

El espectrofotómetro es un instrumento que permite proyectar un haz de luz a través de una muestra y medir la absorbancia (la cantidad de luz absorbida por la muestra) o la transmitancia (la cantidad de luz que pasa a través de la muestra, es decir, el recíproco matemático de la absorbancia). La cantidad de luz absorbida o transmitida a una determinada longitud de onda es proporcional a la concentración del material. Si el material no absorbe luz por sí mismo, se puede mezclar con otros reactivos para obtener, mediante una reacción química específica, una solución que sí absorba luz.

AUTORES:

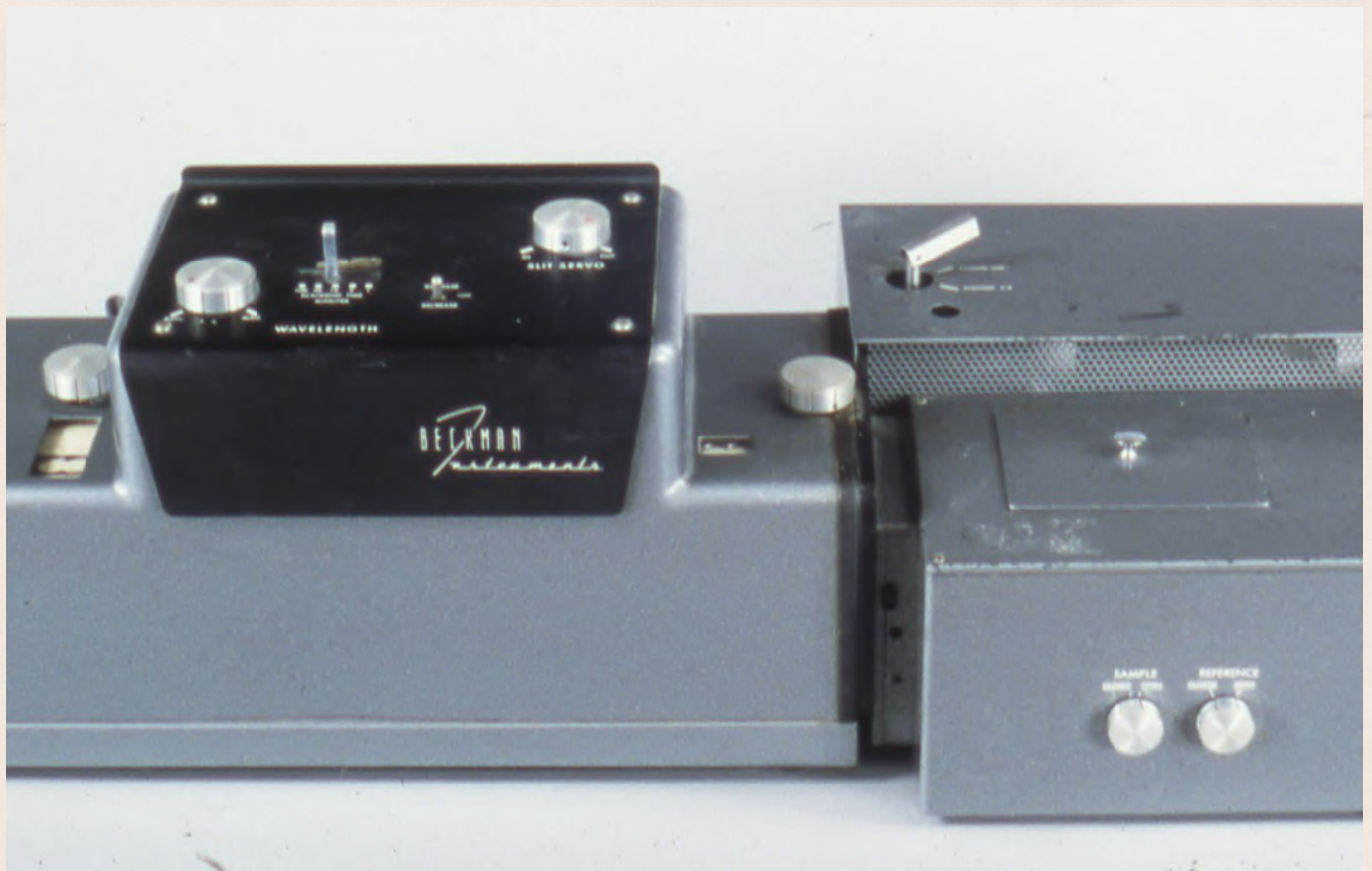
Raúl Britos,
Anarella Gatto y
Marcelo Gurin.

PRIMER ESPECTROFOTÓMETRO

Medir las energías absorbentes del dióxido de carbono, ozono, hidrocarburos y vapor de agua.

El primer registro de un proto-espectrofotómetro data de 1859, cuando un científico que estudiaba las características de los gases construyó un equipo para medir las energías absorbentes del dióxido de carbono, ozono, hidrocarburos y vapor de agua.

Para su sorpresa, los gases completamente incoloros absorbían luz en algunas longitudes de onda mientras que otras longitudes no eran absorbidas.



ESPECTROFOTÓMETRO DE BECKMAN

En 1940, Arnold O. Beckman y sus colegas del National Technologies Laboratories Company, utilizando un amplificador de un medidor de pH, un prisma de vidrio y una fotocélula de tubo de vacío, fabricaron su primer espectrofotómetro.

El rendimiento de este primer modelo no fue satisfactorio, por lo que se lo modificó en un modelo B. La sustitución del prisma de vidrio por uno de cuarzo generó una sorprendente mejora en la capacidad para trabajar en longitudes de onda ultravioleta (UV).



En un modelo C se mejoró la resolución en longitudes de onda UV. Finalmente, se desarrolló un modelo D, conocido como el modelo DU, que incorporó la parte electrónica dentro de la caja del instrumento e incluyó una nueva lámpara de hidrógeno. Este modelo poseía una mayor resolución y una menor pérdida de luz, lo que aumentó el rendimiento y la precisión de las mediciones de un 25 % a un 99 %, estableciendo un nuevo estándar de calidad en los análisis químicos.

Luego de la revolución generada por el espectrofotómetro de Beckman, otras compañías empezaron a comercializar distintos modelos de este instrumento. El espectrofotómetro Spectronic 20 desarrollado por Bausch & Lomb en 1953 se convirtió en un instrumento estándar de la industria y probablemente el espectrofotómetro más utilizado en el mundo debido a su bajo costo y alta precisión.



Impacto del espectrofotómetro Beckman DU:

1 Análisis de vitamina A:

La primera publicación que utilizó un espectrofotómetro "Beckman DU" fue en 1942 para el análisis del contenido de vitamina A en los suplementos que se producían para las tropas desplegadas en la Segunda Guerra Mundial. Antes del Beckman DU, el ensayo para evaluar la concentración de vitamina A en suplementos incluía:

- Alimentar a las ratas con una dieta rica o pobre en su suplemento durante tres semanas.
- Medir la longitud del crecimiento de la cola.
- Correlacionar la cantidad de crecimiento óseo con la concentración de vitamina A.

Este método era muy lento, implicaba el cuidado de los animales y se basaba en la longitud de la cola de la rata para medir la ingesta de vitamina A.

Después del Beckman DU, el ensayo para probar la concentración de vitamina A en los suplementos fue:

- Disolver el suplemento en agua.
- Medir los espectros de absorción.

Impacto: reducción de un experimento de 3 semanas a 10 minutos, con mayor precisión y repetibilidad.

2 Fabricación de caucho y control de calidad:

Durante la Segunda Guerra Mundial, se cortó el suministro de caucho natural de EE. UU. y el ejército comenzó a fabricar caucho sintético. Sin embargo, el bajo rendimiento de caucho utilizable no pudo satisfacer las necesidades de los suministros de neumáticos para apoyar el esfuerzo de guerra.



BECKMAN

Bulletin 91-C

NATIONAL TECHNICAL LABORATORIES SOUTH PASADENA, CALIFORNIA

OPERATING INSTRUCTIONS

THE BECKMAN MODEL DU PHOTOELECTRIC QUARTZ SPECTROPHOTOMETER

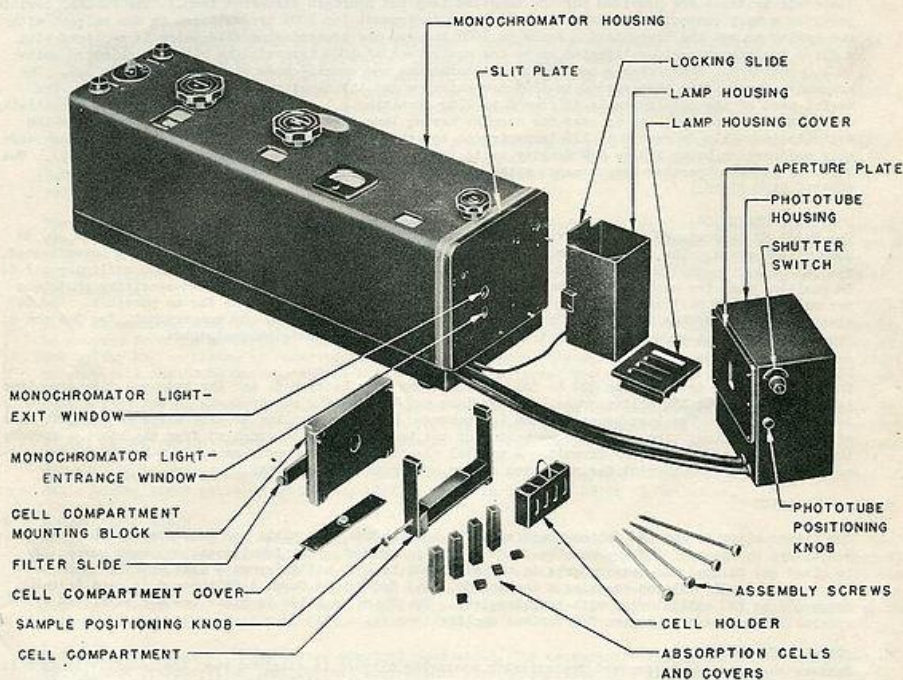


Figure 1.

Photograph of Model DU Spectrophotometer showing Mounting Block, Cell Compartment, Phototube Housing and Lamp Housing detached from the Monochromator.

3 Análisis de ácidos nucleicos:

A mediados de la década de 1940, los científicos luchaban por comprender la composición química de la información genética heredada, lo que ahora sabemos es el ADN. Utilizando un Beckman DU, Edwin Chargaff realizó experimentos que descubrieron el espectro de absorción de los cuatro nucleótidos del ADN y que la abundancia de adenina era la misma que la de timina y que la guanina era la misma que la de citosina. Este descubrimiento condujo a la teoría de los pares de bases del ensamblaje del ADN, que fue esencial para resolver más tarde la estructura de doble hélice del ADN.

Para garantizar la calidad de los productos de caucho, era necesario determinar la concentración de butadieno en los materiales de origen. Dada la calidad de los espectrofotómetros Beckman iniciales, la Oficina de Reserva de Caucho de EE. UU. le pidió a Beckman Instruments que comenzara la construcción de espectrofotómetros IR basados en el diseño utilizado por Shell Development Company para así poder medir la concentración de los materiales de origen justo antes de que se usaran en la producción de caucho.

En 1942, los modelos IR-1 de Beckman se utilizaron en todas las fábricas de caucho sintético para analizar los materiales constituyentes durante la fabricación.

Impacto: ¡comenzó el control de calidad en línea de los procesos de fabricación!

JUSTIFICAR



Recuerda que justificar implica interpretar un fenómeno y vincularlo con la teoría o sea el porqué de la explicación que damos. Para realizar un texto justificativo se pueden utilizar conectores como "porque", "debido a" o "ya que", entre otros.

GUÍA DE TRABAJO

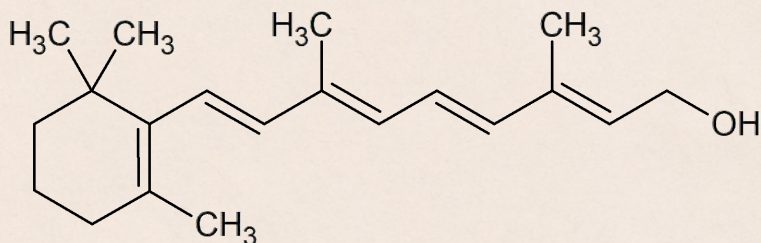
1.1) Realiza un breve resumen del texto que destaque por lo menos las cuatro ideas más importantes del mismo. Si deseas puedes hacer un mapa conceptual.

1.2) ¿Qué te aportó el texto que no sabías?

1.3) ¿Cómo valoras los aportes del uso del espectrofotómetro para la sociedad? Justifica tu respuesta.

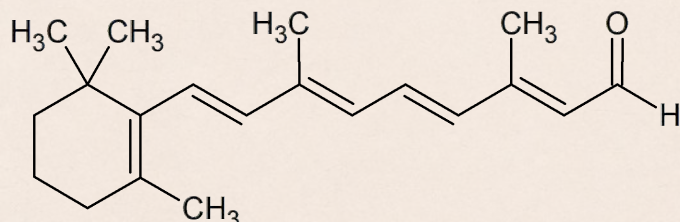
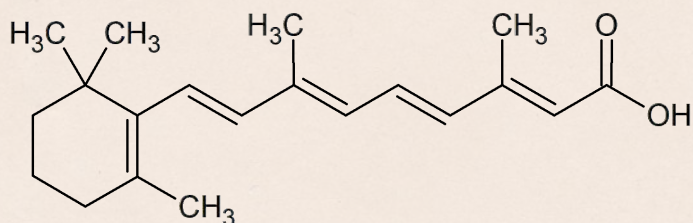
La vitamina A es un grupo de compuestos orgánicos insaturados con múltiples funciones en el organismo. Es importante para un correcto crecimiento y desarrollo, para el mantenimiento del sistema inmune y para la visión.

Una de las formas más importantes de la vitamina A es el retinol, cuya fórmula estructural es la siguiente:



2.1) Identifica los grupos funcionales presentes en la molécula de retinol.

2.2) Otras de las formas de la vitamina A son el retinal y el ácido retinoico, cuyas fórmulas estructurales se presentan a continuación:



¿Cuál consideras que es la molécula de retinal y cuál la del ácido retinoico? ¿En qué se diferencia cada una con la molécula de retinol? ¿Consideras que es posible la interconversión de unas en otras? Justifica tus respuestas.

2.3) En el texto se mencionan los pasos para la cuantificación de vitamina A antes y después de la invención del espectrofotómetro. Comenta el método más antiguo discutiendo aspectos relativos a su precisión y exactitud. ¿Consideras que es un método fiable?

2.4) ¿Qué variables intervienen en el método tradicional? ¿Cuál es la pregunta investigable para el análisis de la vitamina A según este método?

3. El compuesto 1,3-butadieno se utiliza como una molécula monomérica para fabricar el polímero llamado Caucho de forma sintética.

3.1) Explica lo que entiendes por molécula monomérica y polímero.

3.2) Formula el 1,3-butadieno. Representa y nombra dos de los isómeros posibles y clasifícalos.



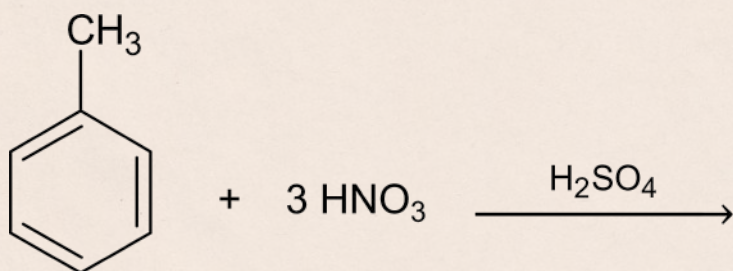
TNT

El estallido de la Segunda Guerra Mundial generó que el espectrofotómetro se utilizará en investigación con fines bélicos. Por ejemplo, se estudió el tolueno para la producción del explosivo trinitrotolueno (TNT), y se utilizó el benceno y los butadienos para la producción de caucho sintético, necesario en la fabricación de neumáticos para jeeps, aviones y tanques de guerra. Para este fin, Beckman Instruments y Shell Development se unieron en 1942 para crear el primer espectrofotómetro infrarrojo (IR), que permitió subsanar la demanda de caucho natural. El espectrofotómetro también fue una herramienta importante para los científicos que estudiaron y produjeron la penicilina de uso médico que se utilizó durante la misma guerra.

4.1) Se puede sintetizar el 2,4,6-trinitrotolueno por nitración del tolueno aunque no es muy rentable desde el punto de vista económico ya que se obtiene un rendimiento muy bajo del 10 %. ¿A qué puede deberse que el rendimiento sea tan bajo? Justifica.

4.2) ¿Qué función cumple el ácido sulfúrico en la síntesis?

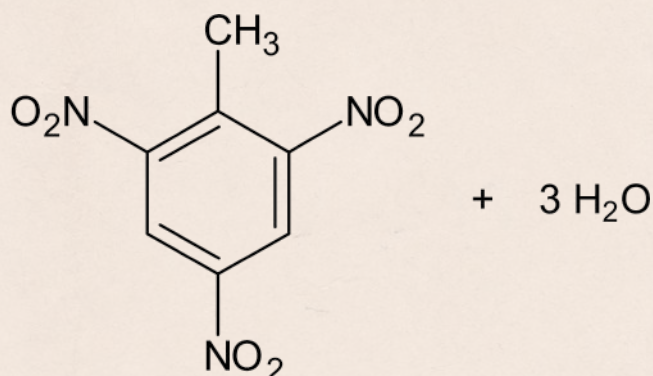
4.3) Si se hacen reaccionar 120,00 g de tolueno 97 % de pureza con un exceso de ácido nítrico en medio sulfúrico, ¿qué masa de 2,4,6-trinitrotolueno se obtiene?

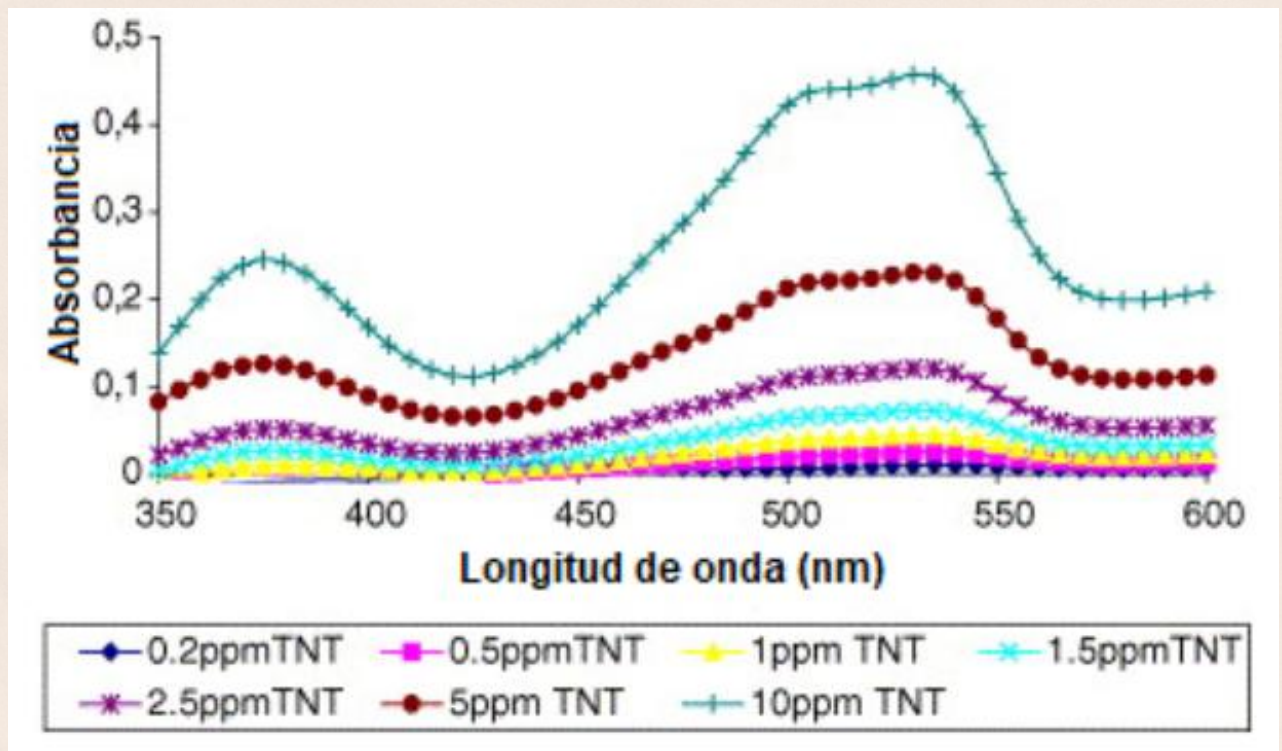


4.4) ¿Qué información necesitas buscar para almacenar en un recipiente con su respectiva etiqueta el TNT obtenido en la síntesis? Explica qué colocarías en la etiqueta según la normativa vigente en nuestro país (Dec 307/009).

5. Como se menciona en el texto, el espectrofotómetro es capaz de proyectar un haz de luz de una determinada longitud de onda a través de una muestra y medir la cantidad de luz que fue absorbida por ella, devolviendo un valor numérico denominado absorbancia. Si para una misma muestra se realizan medidas a diferentes longitudes de onda, el gráfico de la absorbancia en función de la longitud de onda se denomina espectro de absorción. En la siguiente página aparece una gráfica en la que se representan los espectros de absorción para soluciones patrón con diferente concentración de trinitrotolueno (TNT), preparadas de acuerdo a un método de análisis particular.

5.1) Indica el procedimiento para preparar 500,00 mL de una solución patrón de TNT en acetona, de concentración 100 ppm. Incluye en el procedimiento las medidas de seguridad que consideres necesarias para preparar la solución. Si no dispones de acetona, ¿qué otro solvente consideras se podría usar? ¿Cómo lo explicas?





5.2) ¿Cómo es posible preparar soluciones con las concentraciones indicadas en el gráfico a partir de la solución patrón de 100 ppm?

5.3) Observando el gráfico, ¿qué sucede con los valores de absorbancia a medida que se consideran soluciones de mayor concentración? ¿Para qué longitud de onda (aproximada) las diferencias de absorbancia son más notorias entre las distintas soluciones?

6. El año pasado fue bastante atípico en la educación debido a la pandemia. ¿Qué modalidades de trabajo (sin importar en qué asignatura fueron) te gustaron más y por qué? ¿Cuáles prefieres que no se vuelvan a utilizar y por qué?

Créditos

Referencias bibliográficas:

- González, M. y Montaña, L. (2015). La espectroscopia y su tecnología: Un repaso histórico y su importancia para el siglo XXI. *Latin-American Journal of Physics Education*, 9 (4). Recuperado de: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=5514757>
- García, R. (2018). Instrumentos que revolucionaron la química: la historia del espectrofotómetro. *Avances en Química*, 13(3), 79-82. Recuperado de: https://www.researchgate.net/publication/331047439_Instrumentos_que_revolucionaron_la_quimica_la_historia_d_el_espectrofotometro
- Beckman Foundation. (s.f.). Spectrophotometer. Recuperado de: <https://www.beckman-foundation.org/about-foundation/inventions/spectrophotometer/>
- Illana, J. (2014). Antecedentes de la función y la estructura del ADN. Identificación de la naturaleza de las moléculas portadoras del mensaje genético. *Anales de Química*, 110 (3), pp 225-233. Recuperado de: <https://dialnet.unirioja.es/descarga/articulo/6072411.pdf>

Imágenes:

- DU spectrophotometer: : https://www.wikiwand.com/en/DU_spectrophotometer./https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/a/a3/James_Feeman_using_Beckman_DU_spectrophotometer_2004.012.021_crop.tif/lossy-page1-1160px-James_Feeman_using_Beckman_DU_spectrophotometer_2004.012.021_crop.tif.jpg / https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Beckman_DR1_Spectrophotometer_2002.03.004b.tif/
- Póster penicilina: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Penicillin_poster_540.tif
- Robert Merrifield: https://es.wikipedia.org/wiki/Robert_Bruce_Merrifield#/media/Archivo:R._B._Merrifield.jpg
- pHmetro: https://en.wikipedia.org/wiki/File:Beckman_Model_M_pH_Meter_2006.072.002.tif
- Arnold Beckman: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Beckman_Coulter.jpg
- Gráfica ejercicio 6. Ayşem Üzer, Erol Erçağ, Reşat Apak. (2005). Selective spectrophotometric determination of TNT in soil and water with dicyclohexylamine extraction. *Analytica Chimica Acta*, 534 (2). Recuperado de: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0003267004015739>
- Estructuras de retinol, ácido retinoico y retinal. Diseñados con ChemsSketch.
- Síntesis del TNT. Diseñado con ChemsSketch.
- Icono pluma: <https://www.flaticon.com/svg/vstatic/svg/16/16294.svg?token=exp=1613156774~hmac=9a396b298d0bcb9cda3d42cf2ba6a79>
- Icono TNT: <https://www.flaticon.com/svg/vstatic/svg/1987/1987252.svg?token=exp=1613157930~hmac=618d9557877a8c71b25fd9f86d99bc68>