

Diseño de un Sistema Integrado de Espectrometría en el Rango de Luz Visible para Determinación de Metanol en Bebidas Alcohólicas Comerciales.

Abstract– The present article comprises the implementation of a Spectrometer in the range of visible light applicable specifically to the measurement of concentration of methanol in commercial alcoholic beverages. This device will have differentiating elements compared to those available in the market such as portability, control and display of parameters and measurements from a Smartphone with Android operating system and the ability to communicate with a web application through the Smartphone. This Web application will serve as a database, as a display element and as a data analysis element.

I. INTRODUCCIÓN

Las aplicaciones relacionadas con la medición de la concentración de una sustancia disuelta en otra son muchas, van desde aplicaciones industriales, pasando por medición de parámetros medio ambientales, hasta aplicaciones médicas entre otras.

Una de las aplicaciones que merece especial atención es la medición de la concentración de metanol en las bebidas alcohólicas de consumo recreativo. En términos generales las bebidas alcohólicas recreativas no deben contener metanol, sin embargo debido a la alta demanda y a la buena rentabilidad de este producto, algunas personas se dedican a producir y adulterar bebidas alcohólicas, generalmente sin seguir procesos de control de calidad y sin registros sanitarios que aseguren la no presencia de Metanol y su aptitud para el consumo humano (Guilcapi & Quito, 2012). El Metanol, al ser ingerido, es procesado por el organismo y se transforma en Acido Fórmico y luego en Formaldehído que es una sustancia nociva para la salud que puede producir ceguera, convulsiones e inclusive la muerte (Gutierrez, 2011).

La determinación de la concentración del metanol se puede realizar por diferentes métodos entre ellos la Cromatografía de gases, sin embargo, dichos métodos generalmente se llevan a cabo en ambientes controlados con equipos muy costosos. Debido a esto, la detección de las bebidas alcohólicas con metanol generalmente se da después de que se perciben los síntomas de sus efectos nocivos.

Por otra parte los recientes avances en la electrónica y en las tecnologías de almacenamiento de energía permiten tener dispositivos como los Smartphone que tiene grandes prestaciones de hardware y una gran cantidad de sensores que combinados con la amplia adopción de estas tecnologías por parte del común de las personas y con la disponibilidad de conexión a internet a un precio accesible los convierten en unas plataformas ideales para la implementación de soluciones basadas en aplicaciones Web para la adquisición, almacenamiento y procesamiento de datos (Roda, y otros, 2016).

La Fundación Tecnológica Antonio de Arévalo entre las líneas de investigación de La Facultad de Diseño e Ingeniería trabaja la Instrumentación y control de procesos industriales, la Electricidad y electrónica y los Sistema de información y desarrollo de software. Dichas líneas de investigación están soportadas por un equipo docente de excelente calidad con estudios de Especialización o superiores con diferentes áreas de experticia e inclusive con grupos de estudiantes vinculados a semilleros de investigación.

Teniendo en cuenta las razones anteriormente expuestas, se plantea la siguiente pregunta de investigación: ¿Es posible desarrollar un sistema de espectrometría en el rango de la luz visible integrados con Smartphone y con aplicaciones web para la medición de concentración de Metanol en bebidas alcohólicas en La Fundación Tecnológica Antonio de Arévalo? El presente proyecto busca responder esta pregunta.

II. IMPACTO ESPERADO

El presente proyecto comprende la implementación de un dispositivo electrónico portátil para realizar pruebas de Espectrometría en el rango de luz visible. El dispositivo contará con medios para seleccionar los parámetros de las pruebas y también una visualización local de los resultados de las mediciones por medio de un Smartphone. Cuenta también con comunicación a una aplicación Web para el almacenamiento y posible análisis de los resultados.

El desarrollo del proyecto implicará la interacción de distintas áreas del conocimiento como lo son la instrumentación y el control de procesos, La electrónica y los sistemas informáticos por lo que con este desarrollo interdisciplinario se enriquecerá el know how de los profesores involucrados en el desarrollo del proyecto así como también el de los estudiantes pertenecientes a los semilleros Desarrollo de TI y CONPI.

Según la revisión realizada sobre el estado actual de la espectrometría visible, no se encontraron desarrollos realizados acerca de esta temática en la ciudad de Cartagena por lo que TECNAR podría posicionarse como la institución pionera de este tipo de desarrollos en Cartagena y en la región de Bolívar. Adicionalmente el desarrollo tecnológico que se adquiere con el presente proyecto, permite sentar las bases de desarrollos posteriores más complejos y potencialmente más beneficiosos para la institución y para la sociedad en general como por ejemplo desarrollos relacionados con espectrometría ultravioleta o con espectrometría infrarroja.

En cuanto a la aplicabilidad del dispositivo desarrollado vale la pena mencionar que un dispositivo portátil para la medición de la concentración de metanol sería de gran utilidad para las autoridades y para la población civil en la lucha contra el licor adulterado y en el cuidado del bienestar y la salud de las personas que ingieren bebidas alcohólicas de forma recreativa. En el interior de la institución, la tecnología de espectrometría en el rango de la luz visible también puede ser aprovechada para la medición de muchos otros analitos en distintas soluciones por medio de algunos cambios en la preparación de las muestras.

III. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE

Las moléculas están compuestas por átomos que tienen una determinada masa y que están conectados por medio de enlaces elásticos. Esos enlaces pueden ser afectados por ondas electromagnéticas, produciéndose así diversos movimientos en los enlaces de los átomos y este fenómeno a su vez puede ser medido como una absorción de energía por medio de instrumentos llamados espectrómetros.

La espectroscopia es un término general para la ciencia que trata de las distintas interacciones de la radiación electromagnética con la materia.

Existe un rango especial en el espectro electromagnético conocido como luz visible que se refiere a las longitudes de onda que pueden ser captadas por el sentido de la vista de los seres humanos.

Cuando se estudia la espectrometría en el rango de la luz visible, indudablemente se tiene que estudiar el color, el color es la interpretación que da el cerebro humano de un cierto rango de longitudes de ondas comprendidos aproximadamente entre los 380 nm y los 740 nm. Las longitudes de onda y la frecuencia para las ondas electromagnéticas están relacionadas entre sí por medio de la ecuación $\lambda=c/f$, donde λ es la longitud de onda, c es la velocidad de la luz y f es la frecuencia. Si un haz de luz blanca que contiene todas las longitudes de onda visibles incide sobre un objeto, algunas longitudes de onda son absorbidas y otras son reflejadas, el color de los objetos que normalmente se percibe por medio del sentido de la vista, corresponde a todas las longitudes de onda que fueron reflejadas por el objeto (Ohta & Robertson, 2005).

La espectrofotometría UV-visible es una técnica 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 espectrómetro, 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.

Existen diferentes tipos de instrumentos basados en la medición de la absorbancia y transmitancia según la ley de Beer – Lambert para como los son los Espectrómetros y los Colorímetros. Cada uno de estos instrumentos tiene sus ventajas o desventajas dependiendo de lo que se quiere medir.

El espectrómetro somete la solución a un barrido de longitudes de onda conocidas tratando de abarcar una porción amplia del espectro electromagnético que bien puede ser desde el ultravioleta cercano hasta el infrarrojo cercano en la Espectrometría UV-VIS, o puede abarcar el espectro infrarrojo cercano hasta el infrarrojo medio o lejano en la Espectrometría IR. Ambos métodos pueden entregar información acerca de una solución, teniendo cada uno mejores resultados dependiendo de la sustancia a analizar.

En el caso de la Colorimetría lo que se hace es medir la absorbancia y la transmitancia de una solución con una concentración conocida ante unas determinadas longitudes de onda del espectro electromagnético en el rango de la luz visible, generalmente se utilizan los colores Rojo, Verde y Azul, pero hoy en día es posible implementar más longitudes de onda por medio de semiconductores LED y de esta forma obtener más detalles acerca de la solución que se está analizando.

La espectrometría es un método analítico que permite conocer cuantitativamente la concentración de una sustancia en una solución. El funcionamiento de los Espectrómetros está fundamentado en los conceptos de Transmitancia y absorbancia.

La Transmitancia se define como $T=P/P_0$ en donde P_0 es la intensidad lumínica que se capta después que un haz de luz atraviesa una muestra con concentración cero del material a analizar, y P es la intensidad lumínica que se capta después que un haz de luz atraviesa una muestra con concentración desconocida del material a analizar. Para que la relación sea correcta ambas mediciones se deben realizar bajo las mismas condiciones. A partir de esta definición, se tiene que la Absorbancia es el logaritmo negativo de la Transmitancia $A=-\log [P/P_0]$ o $A=\log [P_0/P]$.

La ley de Lambert – Beer establece que la Absorbancia de una muestra es proporcional a la concentración de la sustancia que absorbe la luz incidente y esta descrita por la ecuación $A=a*b*c$ donde a es una constante que depende de la sustancia por sí misma, así como también de la longitud de onda a la que es sometida, b es la longitud de paso óptico a través del cual la luz viaja en la muestra y c es la concentración de la sustancia que absorbe la luz. Si la concentración se expresa en moles/Litros y la longitud del paso óptico en centímetros, entonces la constante a queda expresada en Litros/(moles*centímetros) y se conoce con el nombre de absortividad molar representada por el símbolo ϵ . Finalmente la ecuación de absortividad queda definida como: $A=\epsilon*b*c$ (Rubinson & Rubinson, 2001).

Si bien existe una gran cantidad de equipos comerciales para realizar colorimetría en laboratorios o en vivo, generalmente su costo es relativamente elevado lo que dificulta su adopción generalizada.

La implementación de equipos para espectrometría con semiconductores modernos y de bajo costo ha sido objeto de estudio en diversos centros de investigación desde hace más de veinte años como el trabajo de (Matsuo, Muromatsu, Katayama, & Mori, 1989) sin embargo, también se encuentran trabajos recientes relacionados con el tema como los trabajos de (Bhangale, 2014), (Delgado, Quintero-Ortega, & Vega-Gonzalez, 2014) y (Clippard, Hughes, Chohan, & Sykes, 2016) por lo que se considera una temática de investigación vigente.

Actualmente existe una tendencia a integrar los dispositivos móviles en muchas actividades de la vida cotidiana, pero también es posible aprovechar las capacidades de los Smartphone en el campo de la investigación aprovechando las

grandes prestaciones de hardware de estos dispositivos para implementar funciones de interfaces gráficas, almacenamiento de información y procesamiento de datos (Roda, y otros, 2016).

Existe entonces un nicho de oportunidades para la Fundación Tecnológica Antonio de Arévalo ya que los diferentes desarrollos encontrados incluso a nivel internacional se centran en desarrollar dispositivos orientados únicamente a la toma de mediciones ya sea *in vitro* o *in situ* pero sin aprovechar la capacidad de los Smartphone o de las aplicaciones web. El valor agregado que se puede ofrecer por medio de estas tecnologías es muy amplio e incluye funciones tales como la visualización, la automatización de mediciones, la Teleoperación de dispositivos, el almacenamiento de grandes volúmenes de datos, y el procesamiento de datos entre otros.

IV. METODOLOGÍA PROPUESTA

De los distintos tipos de investigación que hay según la clasificación de (Zorrilla Arena, 1993), se realiza una investigación aplicada con pruebas de funcionamiento del dispositivo construido en un ambiente controlado o de laboratorio.

En general un espectrómetro está compuesto por una fuente de radiación, un selector de longitud de onda, un recipiente de dimensiones conocidas para la muestra, un detector de radiación y un elemento de visualización. En el presente proyecto se incluirá una interfaz intermedia de control y visualización de datos en un Smartphone y una interfaz final de almacenamiento visualización y análisis de datos en un aplicativo web. Estos componentes se desarrollaran de forma paralela siempre que sea posible para facilitar su integración en un producto final. En la Figura 1 se puede apreciar un esquema general del equipo que se está desarrollando.

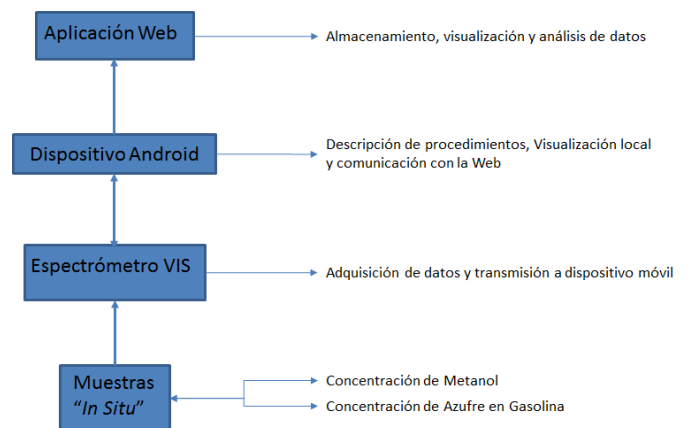


Figura 1. Bloques funcionales del prototipo.

Tradicionalmente la generación de los haces de luz monocromática de los Colorímetros se obtenían por medio de filtros que trataban de obtener un rango de longitudes de ondas correspondientes a un determinado color. Hoy en día los semiconductores LED permiten obtener luz con anchos de bandas muy estrechos centrados en el valor correspondiente a un color, por lo que se obtienen haces de luz muy cerca a los ideales según el concepto de monocromía. Adicionalmente estos dispositivos presentan una alta eficiencia en cuanto a transformación de energía eléctrica en luz y son fáciles de controlar. Por otra parte se encuentran disponibles a bajo costo elementos sensibles a longitudes de onda entre los 400 y los 900 nanómetros.

En cuanto a la integración y el control del dispositivo como un todo, los microcontroladores se presentan como una solución que es de bajo costo, que permite la comunicación con un computador personal o con un Smartphone por medio del protocolo USB o Bluetooth y que tienen una cantidad suficiente de entradas y salidas analógicas y digitales para implementar una gran cantidad de funciones.

Para la implementación del espectrómetro se construirá un contenedor que garantice la ausencia de luz externa, este contenedor se diseñará con ayuda de software CAD tipo Solid Edge para luego contratar el servicio de impresión 3D. En la Figura 2 se pueden presentar las características deseadas para el contenedor del espectrofotómetro.

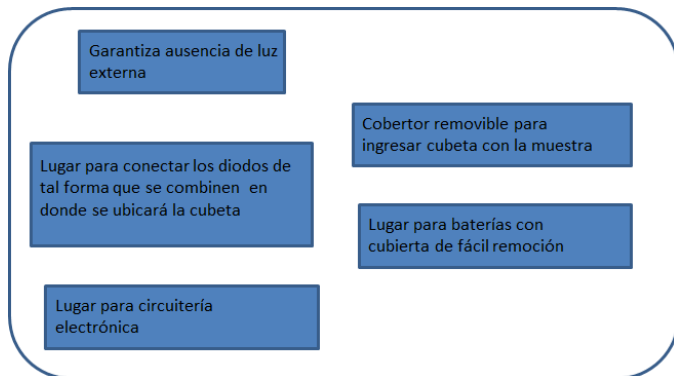


Figura 2. Características del contenedor del espectrómetro.

El selector de Longitudes de onda se implementará por medio de leds rojo, verde y azul los cuales al variarles la intensidad por medio de un PWM generado por un microcontrolador permitirán implementar el barrido por el espectro visible.

Se medirá la intensidad lumínica por medio de un sensor TCS3200 que está diseñado para tener una respuesta casi plana en todo el espectro de luz visible, para esto se programará un microcontrolador para medir una frecuencia

que va a ser directamente proporcional a la intensidad lumínica, con estos datos se programará un software para Android OS en el que se calcularán los datos de transmitancia y absorbancia para poder enviar esa lectura de forma inalámbrica hasta el aplicativo Web.

La fuente de alimentación se implementará por medio de un convertidor DC – DC comercial para utilizar con baterías AA. Una vez construido el dispositivo se realizarán una serie de experimentos buscando caracterizar el funcionamiento del dispositivo y compararlo con el funcionamiento de un espectrómetro comercial, los resultados de estas pruebas se utilizarán para la elaboración de productos de conocimiento como ponencias y artículos en revistas indexadas. Los diferentes componentes electrónicos que constituyen el prototipo pueden ser observados en conjunto en la Figura 3.

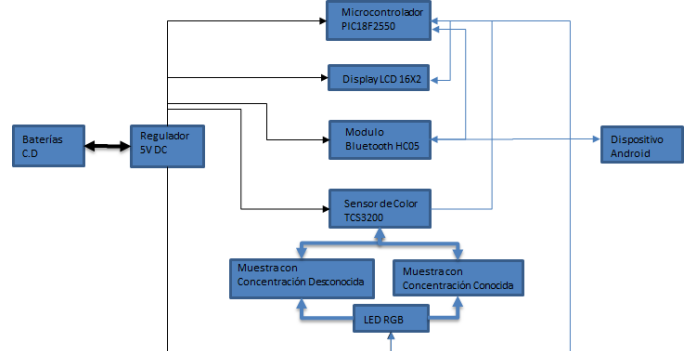


Figura 3. Detalle del bloque Espectrómetro VIS.

El aplicativo Android se implementará con ayuda del IDE Eclipse, Se diseñará una interfaz gráfica para la visualización preliminar de las mediciones realizadas con el espectrómetro, tendrá la capacidad de controlar el espectrómetro y de recibir información proveniente desde este y contará con un almacenamiento de memoria de bucle para almacenar los datos mientras son transferidos al aplicativo web. En la Figura 4 se tiene un esquema de las funciones que se ejecutarán en el aplicativo Android.

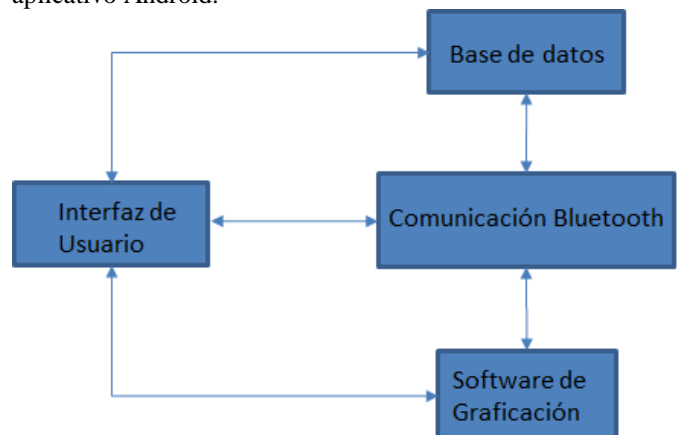


Figura 4. Detalle del bloque Aplicación Android.

El aplicativo Web se desarrolla con el editor multiplataforma y open source Eclipse, se almacenará la información en una base de datos MySQL que será accedida por medio de la interfaz web en un PC o cualquier dispositivo móvil con un navegador soportado por el aplicativo web desarrollado. La visualización de los datos permitirá la interacción del usuario para realizar funciones como cursores o como acercamientos y se desarrollará un módulo para analizar los datos obtenidos de las mediciones y entregar resultados más elaborados. En la figura 5 se tiene un esquema de las funciones que se ejecutarán en el aplicativo web.

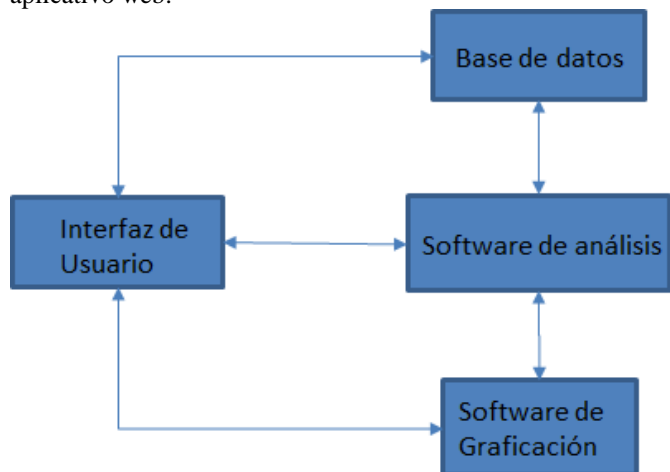


Figura 5. Detalle del bloque Aplicación web.

Para la medición de la concentración de metanol se propone transformar por medio de reacciones químicas el metanol que es incoloro en formaldehído, a este reactivo se le agrega ácido cromotrópico en presencia de ácido sulfúrico para producir una coloración que es violeta y de esta forma se puede utilizar el método de la colorimetría. Al conocer la concentración de formaldehído, de forma indirecta se puede conocer la concentración del Metanol.

V. PRODUCTOS

El principal resultado del proyecto es un sistema integrado con las TIC para la detección *in situ* de metanol en bebidas alcohólicas. Por medio de este dispositivo se pretende ofrecer un medio para disminuir el número de casos de intoxicación por metanol relacionados con el consumo de bebidas alcohólicas ya que por ser un desarrollo local se facilitaría el acceso a esta tecnología a las personas implicadas tanto en la población civil como en las autoridades competentes.

Se plantea la validación del funcionamiento del dispositivo comparando su funcionamiento con equipos similares pero orientados a ambientes de laboratorio. Este estudio permitirá establecer las características de funcionamiento del dispositivo

desarrollado y permitiría determinar si la utilidad del desarrollo es suficiente para explorar la posibilidad de un registro de patente o modelo de utilidad.

Debido a la naturaleza del proyecto la principal estrategia de transferencia consiste en validar el funcionamiento del dispositivo comparando su funcionamiento con otro equipo comercial disponible. Una vez se tengan unos resultados de funcionamiento satisfactorio se puede pensar en explorar la posibilidad de solicitar un registro de modelo de utilidad. Entre las instituciones que podrían estar interesada en el dispositivo se tiene a la policía nacional y en general a cualquier ciudadano que ingiera bebidas alcohólicas.

Entre los posibles usuarios de un dispositivo portátil para la detección de metanol en bebidas alcohólicas se tienen los organismos de control relacionados con la calidad de las bebidas alcohólicas y en general a todas las personas que ingieren alcohol con fines recreativos.

Esta investigación propone nuevos métodos o estrategias metodológicas para la medición de la concentración de metanol en bebidas alcohólicas, sin embargo, su aplicación puede contribuir a resolver problemas asociados a la identificación de sustancias químicas presente en diferentes matrices de interés privado y gubernamental relacionadas con la industria farmacéutica, la industria del petróleo, la industria de los alimentos, agencias de aplicación de la ley tales como: la FDA (estados unidos), la DEA, el INVIMA, policía y armada nacional. Todo esto en mayor o menor medida dependiendo si los analitos identificables por medio de espectrometría visible están presente en una muestra de interés.

REFERENCES

T. Matsuo, A. Muromatsu, K. Katayama y M. Mori, «Construction of a Photoelectric Colorimeter and Application to Student's Experiments,» *Journal of Chemical Education*, pp. 329-333, 1989.

M. A. Thal y M. J. Samide, «Applied electronics: Construction of a Simple Spectrophotometer,» *Journal of Chemical Education*, pp. 1510-1512, 2001.

Rohit, L. Kanwar y K. K. Rao, «Development of a low-cost portable Colorimeter for the estimation of fluoride in drinking water,» *Sensors and Actuators B: Chemical*, pp. 245-251, 2010.

G. C. Anzalone, A. G. Glover y J. M. Pearce, «Open-source Colorimeter,» *Sensors*, pp. 5338-5346, 2013.

s. P. Bhangale, «Development of Embedded System Based Colorimeter for the analysis of copper in waste water,» *International Journal of Innovative Research in Science Engineering and Technology*, pp. 17869-17876, 2014.

C. M. Clippard, W. Hughes, B. S. Chohan y D. G. Sykes, «Construction and Characterization of a compact, portable, low-cost

Colorimeter for the Chemical Lab.,» *Journal of Chemical Education*, p. 1241–1248, 2016.

M. V. Wilson y E. Wilson, «Authentic Performance in the Instrumental Analysis Laboratory: Building a Visible Spectrophotometer Prototype,» *Journal of Chemical Education*, pp. 1-8, 2016.

A. García, M. Erena, E. D. Marinetto y C. A. Abad, «Mobile Phone Platform as portable Chemical Analyzer,» *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 156, n° 1, pp. 350-359, 2011.

P. Masawat, A. Harfield y A. Namwong, «An iPhone-based digital image Colorimeter for detecting tetracycline in milk,» *Food Chemistry*, pp. 23-29, 2015.

J. Gordon, a. James, S. Harman y K. Weiss, «A Film Canister Colorimeter,» *Journal of Chemical Education*, vol. 79, n° 8, pp. 1005-1006, 2002.

T.-S. Yeh y S.-S. Tseng, «A Low Cost LED Based Spectrometer,» *Journal of Chinese Chemical Society*, vol. 53, n° 5, pp. 1067-1072, 2006.

Z. Rodriguez, R. Narvaez, C. Quiñones, H. Espinosa y D. Ramírez, «Desarrollo de un Dispositivo de Bajo Costo para Detección de Luz Visible Utilizando Instrumentación Virtual,» *Revista Colombiana de Física*, vol. 40, n° 1, pp. 375-378, 2008.

T. Matsuo, A. Muromatsu, K. Katayama y M. Mori, «Construction of a Photoelectric Colorimeter and Application to Student's Experiments,» *Journal of Chemical Education*, pp. 329-333, 1989.

M. A. Thal y M. J. Samide, «Applied electronics: Construction of a Simple Spectrophotometer,» *Journal of Chemical Education*, pp. 1510-1512, 2001.

Rohit, L. Kanwar y K. K. Rao, «Development of a low-cost portable Colorimeter for the estimation of fluoride in drinking water,» *Sensors and Actuators B: Chemical*, pp. 245-251, 2010.

G. C. Anzalone, A. G. Glover y J. M. Pearce, «Open-source Colorimeter,» *Sensors*, pp. 5338-5346, 2013.

s. P. Bhangale, «Development of Embedded System Based Colorimeter for the analysis of copper in waste water,» *International Journal of Innovative Reserch in Science Engineering and Technology*, pp. 17869-17876, 2014.

C. M. Clippard, W. Hughes, B. S. Chohan y D. G. Sykes, «Construction and Characterization of a compact, portable, low-cost Colorimeter for the Chemical Lab.,» *Journal of Chemical Education*, p. 1241–1248, 2016.

M. V. Wilson y E. Wilson, «Authentic Performance in the Instrumental Analysis Laboratory: Building a Visible Spectrophotometer Prototype,» *Journal of Chemical Education*, pp. 1-8, 2016.

A. García, M. Erena, E. D. Marinetto y C. A. Abad, «Mobile Phone Platform as portable Chemical Analyzer,» *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 156, n° 1, pp. 350-359, 2011.

P. Masawat, A. Harfield y A. Namwong, «An iPhone-based digital image Colorimeter for detecting tetracycline in milk,» *Food Chemistry*, pp. 23-29, 2015.

K. A. Rubinson y J. F. Rubinson, *Análisis Instrumental*, Madrid: Pearson Educación S.A., 2001.