



UNIVERSIDAD JUÁREZ AUTÓNOMA DE TABASCO

DIVISIÓN ACADÉMICA DE CIENCIAS BÁSICAS



**“DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN  
EXTRACTO (PECT) DE SUELOS CONTAMINADOS”**

TESIS PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

**LICENCIADO EN QUÍMICA**

PRESENTA:

**JOSÉ ÁNGEL NAVARRO RANGEL**

BAJO LA DIRECCIÓN DE:

**DR. CARLOS MARIO MORALES BAUTISTA**

EN CODIRECCIÓN DE:

**DR. CARLOS ERNESTO LOBATO GARCÍA**

VILLAHERMOSA, TABASCO, A: septiembre de 2024

## Declaración de autoría y originalidad

En la Ciudad de Cunduacán, el día 9 del mes 9 del año 2024, el que suscribe José Angel Navarro Rangel alumna(o) del Programa de Licenciatura en Química con número de matrícula 171A14016, adscrito a la División Académica de Ciencias Básicas, de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, como autor(a) (es) de la Tesis presentada para la obtención del (título, diploma o grado según sea el caso) Título y titulada **DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN EXTRACTO (PECT) DE SUELOS CONTAMINADOS** dirigida por el Dr. Carlos Mario Morales Bautista y el Dr. Carlos Ernesto Lobato García.

### DECLARO QUE:

La Tesis es una obra original que no infringe los derechos de propiedad intelectual ni los derechos de propiedad industrial u otros, de acuerdo con el ordenamiento jurídico vigente, en particular, la LEY FEDERAL DEL DERECHO DE AUTOR (Decreto por el que se reforman y adicionan diversas disposiciones de la Ley Federal del Derecho de Autor del 01 de Julio de 2020 regularizando y aclarando y armonizando las disposiciones legales vigentes sobre la materia), en particular, las disposiciones referidas al derecho de cita.

Del mismo modo, asumo frente a la Universidad cualquier responsabilidad que pudiera derivarse de la autoría o falta de originalidad o contenido de la Tesis presentada de conformidad con el ordenamiento jurídico vigente

Villahermosa, Tabasco a 9 de septiembre 2024.



José Angel Navarro Rangel

Nombre y Firma

## Autorización de impresión



División  
Académica  
de Ciencias  
Básicas



DIRECCIÓN

Cunduacán, Tabasco; a 03 de julio de 2024.

**C. JOSÉ ÁNGEL NAVARRO RANGEL  
PASANTE DE LA LIC. EN QUÍMICA  
P R E S E N T E**

Por medio del presente, me dirijo a usted para hacer de su conocimiento que proceda a la impresión del trabajo titulado “**DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN EXTRACTO (PECT) DE SUELOS CONTAMINADOS**”, dirigido por el Dr. Carlos Mario Morales Bautista y el Dr. Carlos Ernesto Lobato García, bajo la modalidad de titulación por **TESIS**. La comisión de revisión conformada por el Dr. Carlos Mario Morales Bautista, Dr. Carlos Ernesto Lobato García, Dr. Abraham Gómez Rivera y la Dra. Alejandra Elvira Espinosa de los Monteros Reyna, liberó el documento en virtud de que reúne los requisitos para el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente.

Sin otro particular, reciba usted un cordial saludo.

**ATENTAMENTE**



DIVISIÓN ACADÉMICA DE  
CIENCIAS BÁSICAS

**DRA. HERMICENDA PÉREZ VIDAL  
DIRECTORA**

C.c.p. Pasante.  
C.c.p. Archivo.

Km.1 Carretera Cunduacán-Jalpa de Méndez, A.P. 24, C.P. 86690, Cunduacán, Tab., México.  
Tel/Fax: (993) 3581500 Ext. 6702,6701 E-Mail: direccion.dacb@ujat.mx

www.ujat.mx

## Carta de cesión de derechos

Villahermosa, Tabasco a 9 de septiembre de 2024.

Por medio de la presente manifestamos haber colaborado como AUTOR(A) y/o AUTORES(RAS) en la producción, creación y/o realización de la obra denominada **“DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN EXTRACTO (PECT) DE SUELOS CONTAMINADOS”**.

Con fundamento en el artículo 83 de la Ley Federal del Derecho de Autor y toda vez que, la creación y/o realización de la obra antes mencionada se realizó bajo la comisión de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco; entendemos y aceptamos el alcance del artículo en mención, de que tenemos el derecho al reconocimiento como autores de la obra, y la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco mantendrá en un 100% la titularidad de los derechos patrimoniales por un período de 20 años sobre la obra en la que colaboramos, por lo anterior, cedemos el derecho patrimonial exclusivo en favor de la Universidad.

### COLABORADORES



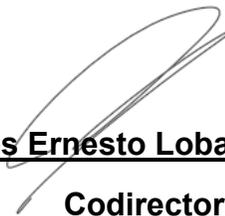
José Angel Navarro Rangel

Egresado



Carlos Mario Morales Bautista

Director



Carlos Ernesto Lobato García

Codirector

### TESTIGOS



Juan Manuel Magaña Piña



Yamilet Yarcily Solís Pérez

# LICENCIATURA - DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN EXTRACTO (PECT) DE SUELOS CONTAMINADOS - JOSÉ A. NAVARRO

INFORME DE ORIGINALIDAD

## 20%

ÍNDICE DE SIMILITUD

### FUENTES PRIMARIAS

1	<a href="http://biblioteca.usac.edu.gt">biblioteca.usac.edu.gt</a> Internet	873 palabras — 7%
2	<a href="http://idoc.pub">idoc.pub</a> Internet	188 palabras — 2%
3	<a href="http://pdfcoffee.com">pdfcoffee.com</a> Internet	114 palabras — 1%
4	<a href="http://qdoc.tips">qdoc.tips</a> Internet	107 palabras — 1%
5	<a href="http://hdl.handle.net">hdl.handle.net</a> Internet	101 palabras — 1%
6	<a href="http://www.scielo.org.mx">www.scielo.org.mx</a> Internet	99 palabras — 1%
7	<a href="http://dof.gob.mx">dof.gob.mx</a> Internet	90 palabras — 1%
8	<a href="http://fddocuments.ec">fddocuments.ec</a> Internet	78 palabras — 1%
9	<a href="http://docs.com">docs.com</a> Internet	74 palabras — 1%

## **Dedicatoria**

### **A mis padres**

#### **Raymundo Navarro González y Beatriz Adriana Rangel Soto**

Dedico esta tesis a ustedes,

por su amor incondicional, esfuerzo y sacrificios.

Por ser un ejemplo constante de perseverancia, resiliencia y fortaleza.

Gracias por brindarme valores sólidos y una educación basada en el respeto, el trabajo duro y la integridad.

Me enseñaron que, a pesar de las dificultades, con dedicación y esfuerzo todo es posible.

Su apoyo y confianza en mí han sido fundamentales en este camino, y este logro es tanto mío como suyo.

Con todo mi amor y gratitud.

José Angel Navarro Rangel

## **Agradecimientos**

### **A mi director de tesis, Dr. Carlos Mario Morales Bautista,**

Mi más sincero agradecimiento por su invaluable orientación y apoyo a lo largo de este proceso. Su paciencia, sobre todo, sabiduría y dedicación fueron esenciales para que este trabajo llegara a buen término. Su compromiso con mi formación ha sido una fuente constante de inspiración y aprendizaje.

### **A mi codirector de tesis, Dr. Carlos Ernesto Lobato García,**

Le agradezco de corazón por su constante apoyo, sus valiosas ideas y contribuciones. Su perspectiva y conocimientos ayudaron a aterrizar mis ideas de manera precisa, permitiéndome ver más allá de los detalles y comprender el panorama general. Aprecio profundamente su generosidad con su tiempo y su disposición para brindarme ayuda y orientación.

### **A mis amigos de la carrera: Gissell Alejandra, Hillary Leticia, José María y Daniel Meneses,**

Gracias por compartir conmigo este increíble viaje académico y de crecimiento personal. Cada uno de ustedes fue una parte fundamental en esta etapa de mi vida, ya sea en los momentos de esfuerzo, cuando parecía que no había salida, o en las risas que hicieron todo más llevadero. Me llevo grandes recuerdos y amistades que, sin duda, permanecerán más allá de esta etapa. Gracias por su compañía y por hacer de este camino algo inolvidable.

### **A mi gran amigo José María González García,**

Por guiarme, apoyarme y comprenderme. Has sido una persona indispensable en este proceso. Tu sabiduría, paciencia y amistad me dieron la fuerza para seguir adelante, incluso en los momentos más difíciles. No solo fuiste un consejero, sino un apoyo fundamental en cada paso del camino, y por eso siempre te estaré agradecido.

### **A mi novia, Isis Valeria Vicencio Graniel,**

Mi amor, gracias por ser mi mayor apoyo y fuente de motivación constante. Tu paciencia, comprensión y amor me dieron la fuerza necesaria para superar cada desafío. En los momentos más difíciles, tus palabras de aliento y tu fe inquebrantable en mí me recordaron que todo era posible. Agradezco cada gesto,

cada sonrisa y cada sacrificio que hiciste por mí durante este proceso. Con todo mi amor y gratitud.

**A mis amigos más cercanos: Juan Piña, Gerardo Gonzalo y Armando Miranda,**

Más que amigos, son mis hermanos. Gracias por ser esa familia que elegí y que siempre ha estado a mi lado, en las buenas y en las malas. Su lealtad, apoyo incondicional y amistad sincera han sido un pilar fundamental en mi vida. Hemos compartido momentos de alegría y superado juntos los retos más difíciles, y no puedo imaginar haber recorrido este camino sin ustedes.

**A mi compañera de maestría, Yamilet Yarcily Solís Pérez,**

Quiero agradecerte por ser un impulso constante, por brindarme siempre tu apoyo incondicional y por ayudarme a no rendirme cuando sentía que ya no podía más. A pesar del poco tiempo que llevamos de conocernos, has logrado ganarte por completo mi cariño y confianza. Valoro profundamente tu amistad sincera y todo lo que has hecho por mí.

**A la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, mi querida alma mater,**

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento por haber sido el escenario de mi formación académica y personal. En sus aulas no solo adquirí conocimientos, sino también valores y experiencias que me han preparado para enfrentar los retos de la vida profesional. Agradezco a los profesores, autoridades y a toda la comunidad universitaria por su dedicación y esfuerzo, que han sido fundamentales en mi crecimiento.

Llevo conmigo el orgullo de haber formado parte de esta gran institución y siempre recordaré con gratitud todo lo que me brindó.

“Estudio en la duda, Acción en la fe”.

## Índice de contenido

Declaración de autoría y originalidad.....	II
Autorización de impresión .....	III
Carta de cesión de derechos .....	IV
Dedicatoria .....	V
Agradecimientos.....	VI
Índice de tablas.....	XI
Resumen .....	XIV
Abstract.....	XIV
Palabras claves.....	XV
1. Introducción .....	1
2. Marco teórico .....	2
2.1. Antecedentes.....	2
2.2. Hidrocarburos.....	3
2.2.1. Hidrocarburos alifáticos saturados: alcanos o parafinas.....	4
2.2.2. Hidrocarburos cíclicos saturados, cicloalcanos o naftenos. ....	4
2.2.3. Hidrocarburos aromáticos.....	5
2.2.4. Hidrocarburos alifáticos insaturados, olefinas o alquenos.....	6
2.2.5. Compuestos indefinidos químicamente .....	7
2.2.5.1. Asfaltenos .....	7
2.2.5.2. Resinas.....	8
2.3. Grados API.....	8
3. Espectroscopía .....	9
3.1.1. Espectroscopía ultravioleta-visible (UV-Vis).....	10
3.1.2. Tipos de electrones absorbentes. ....	11
3.1.3. Especies absorbentes.....	12
3.2. Medición de absorbancia.....	14
3.3. Aspectos cuantitativos de las mediciones de absorción.....	15
3.3.1. Ley de Lambert-Beer. ....	15
3.3.2. Absortividad y absortividad molar. ....	16
3.3.3. Curva de calibración.....	16
3.3.4. Limitaciones a la aplicabilidad de la ley de Lambert-Beer.....	17
3.4. Extracto PECT.....	19

4.	Justificación .....	20
5.	Pregunta de investigación.....	21
6.	Hipótesis.....	21
7.	Objetivos .....	22
7.1.	General.....	22
7.2.	Específicos:.....	22
8.	Metodología.....	23
8.1.	Determinación de °API.....	23
8.2.	Construcción curva de calibración .....	24
8.3.	Construcción y normalización de las curvas .....	24
8.4.	Tratamiento PECT.....	25
9.	Resultados y discusiones.....	27
9.1.	Determinación de grados °API .....	27
9.1.1.	Complemento del análisis para establecer curvas normalizadas .....	28
9.2.	Construcción de las curvas de calibración .....	29
9.2.1.	Selección del solvente .....	29
12.2.2	Estandarización del método .....	30
12.2.3	Selección de la longitud de onda óptima de trabajo .....	32
9.3.	Tratamiento PECT .....	36
9.3.1.	Cuantificación del extracto PECT. (límite establecido en norma). .....	37
10.	Conclusiones .....	40
11.	Perspectivas.....	40
12.	Referencias citadas .....	41
13.	Anexos.....	42
13.1.	Medición de grados API.....	42
13.2.	Cálculo de la concentración 17600 mg/L.....	43
13.3.	Cálculo de la concentración 300 mg/L.....	44
13.4.	Cálculo de las diluciones.....	44
13.5.	Intervalo de trabajo y linealidad .....	44
13.5.1.	Intervalo de trabajo.....	44
13.5.2.	Linealidad.....	45
13.6.	LOD y LOQ.....	46
13.7.	Textura .....	47

13.8. HTP .....	47
14. Glosario .....	48

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.  
México.

## Índice de tablas

<b>Tabla 1. Constantes físicas de algunos cicloalcanos.</b> (A partir de: J.P. Wauquier, 2004).	5
<b>Tabla 2. Constantes físicas de algunos hidrocarburos insaturados.</b> (A partir de: J.P. Wauquier, 2004).	7
<b>Tabla 3. Clasificación de los hidrocarburos según los °API.</b> (Wall Loya <i>et al.</i> , 2024)..	9
<b>Tabla 4. Características de transiciones electrónicas entre orbitales <math>\sigma</math>, <math>\pi</math> y <math>\eta</math>.</b> (Skoog, 2014).	11
<b>Tabla 5. Características de absorción de algunos cromóforos comunes.</b> A partir de Skoog, (2014).	13
<b>Tabla 6. Límite de detección y límite de cuantificación para las fracciones de hidrocarburo y diésel.</b> Construcción propia.	36
<b>Tabla 7. Resultados del extracto PECT a la longitud de onda de 305 nm.</b> Construcción propia.	39
<b>Tabla 8. Datos grados API.</b> Construcción propia.	43
<b>Tabla 9. Proporción de las diluciones.</b> Construcción propia.	44
<b>Tabla 10. Porcentajes de R, L y A de los suelos.</b> (Alegría-Hernández <i>et al.</i> , 2019).....	47
<b>Tabla 11. Datos de la concentración de HTP.</b> (Alegría-Hernández <i>et al.</i> , 2019).....	47

## Índice de figuras

<b>Figura 1. Estructura del metano, C: Carbono, H: Hidrógeno.</b> Fuente construcción propia. ....	4
<b>Figura 2. Estructura de un isoalcano: isopentano.</b> (Jean-Pierre Wauquier, 2004). ....	4
<b>Figura 3. Estructura de la decalina.</b> Fuente construcción propia. ....	5
<b>Figura 4. A) Estructuras resonantes de Kekulé para el benceno, B) Representación del híbrido de resonancia del benceno.</b> Fuente construcción propia.....	6
<b>Figura 5. Estructuras de los tres isómeros del dimetilbenceno (xileno).</b> Fuente construcción propia.....	6
<b>Figura 6. Estructuras de hidrocarburos policíclicos aromáticos representativos</b> .....	6
<b>Figura 7. Representación de moléculas de asfaltenos, estado coloidal (A) y micelar (B).</b> (A partir de: J.P. Wauquier, 2004).....	8
<b>Figura 8. Representación de una molécula de resina.</b> (A partir de: J.P. Wauquier, 2004). ....	8
<b>Figura 9. Espectro electromagnético.</b> A partir de (Skoog (, 2014).....	10
<b>Figura 10. Componentes básicos del espectrofotómetro.</b> (A partir de Quesada Mora, 2007) .....	14
<b>Figura 11. Comportamiento de un haz incidente sobre una celda.</b> (Skoog, 2014).....	15
<b>Figura 12. Curva de calibración.</b> Construcción propia.....	17
<b>Figura 13. Esquema general de la metodología.</b> Construcción propia. ....	23
<b>Figura 14. Determinación de °API por método directo.</b> Construcción propia .....	27
<b>Figura 15. °API normalizados.</b> Construcción propia. ....	28
<b>Figura 16. Representación del momento dipolar del diclorometano (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>).</b> Construcción propia.....	30
<b>Figura 17 A, B y C. Espectro UV-Vis de la fracción mediana, pesada y diésel de 200 a 900 nm.</b> Construcción propia.....	31
<b>Figura 18 A, B y C. Promedio del triplicado para un posterior análisis estadístico.</b> Construcción propia.....	32
<b>Figura 19 A, B y C. Longitudes de onda de 300 nm a 310 nm de las fracciones de HC mediano, pesado y diésel.</b> Construcción propia. ....	33
<b>Figura 20 A y B. Longitud de onda óptima de trabajo para las fracciones de HC mediano, pesado y diésel.</b> Construcción propia. ....	34
<b>Figura 21. Relación entre concentración medida y concentración real.</b> Construcción propia.....	35
<b>Figura 22. Textura de los suelos analizados.</b> Construcción propia.....	37
<b>Figura 23. Comparativa de contenido de HC inicial y final.</b> Construcción propia.....	38

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.

**“DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN  
EXTRACTO (PECT) DE SUELOS CONTAMINADOS”**

## Resumen

Esta tesis, realizada en el laboratorio de suelos e hidrocarburos de la División Académica de Ciencias Básicas (DACB), presenta la evaluación de un método analítico para la cuantificación de Hidrocarburos Totales del Petróleo (HTP) mediante la técnica espectrofotométrica de ultravioleta-visible (UV-Vis). Este método se utiliza para determinar lixiviados de los constituyentes tóxicos del residuo en extractos acuosos, conforme a la NOM-053-SEMARNAT-1993 para el Procedimiento de Extracción de Constituyentes Tóxicos (PECT), con la finalidad de identificar si dicho residuo es peligroso debido a su toxicidad ambiental.

Este método permite cuantificar, a una longitud de onda de 305 nm, el contenido de compuestos cromóforos de los HTP en extractos acuosos provenientes del extracto PECT, mediante una extracción líquido-líquido de los compuestos orgánicos de la fase acuosa con un solvente orgánico. Se utilizó diclorometano ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) como solvente, debido a su afinidad por los HTP conferida por su momento dipolar.

Se comprobó la correlación entre la absorbancia y la concentración de los grupos cromóforos absorbentes mediante la elaboración de curvas de calibración con las fracciones de HTP caracterizadas mediante grados API ( $^\circ\text{API}$ ). Así se determinaron las fracciones mediana y pesada para la elaboración de las curvas, comprobando la Ley de Lambert-Beer.

## Abstract

This thesis, accomplished in the Soils and Hydrocarbons Laboratory of the Academic Division of Basic Sciences (DACB), presents an analytical method for the quantification of Total Petroleum Hydrocarbons (TPH) using the ultraviolet-visible (UV-Vis) spectrophotometric technique. This method is used to determine leachates of toxic constituents present in wastes from aqueous extracts, as established in NOM-053-SEMARNAT-1993 for the Extraction Procedure of Toxic Constituents (PECT), with the purpose of identifying whether the waste is hazardous due to its environmental toxicity.

This method allows for the quantification of chromophoric compounds of TPH at a wavelength of 305 nm in aqueous extracts from the PECT extract, by means of liquid-liquid extraction of the organic compounds from the aqueous phase with an organic solvent. Dichloromethane ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) was used as the solvent due to its affinity for TPH conferred by its dipole moment.

The correlation between absorbance and the concentration of the absorbing chromophoric groups was verified by preparing calibration curves with TPH fractions characterized by API degrees ( $^\circ\text{API}$ ). Thus, the medium and heavy fractions were determined for the preparation of the curves, verifying Lambert-Beer's Law.

**Palabras claves**

Hidrocarburos totales del petróleo, grados API, espectrofotometría, UV-Visible, Extracto PECT, constituyentes tóxicos, cromóforos

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.  
México.

## 1. Introducción

El sector energético en México es una de las bases de la economía de este país, pero también una de las mayores fuentes de contaminación del medio ambiente, algunos de los componentes suelen ser nocivos para la salud debido a su acumulación y biomagnificación. Por estas razones, resulta importante realizar diagnósticos ambientales en los sitios afectados o susceptibles a contaminarse, lo que conlleva determinaciones analíticas que requieren un lapso largo de tiempo.

En este sentido, diversos trabajos han propuesto realizar pruebas preliminares que permitan la toma de decisiones en materia de seguridad y remediación de sitios, pero han encontrado que algunos solventes no extraen el total del analito o bien los métodos espectrofotométricos empleados en campo poseen altas incertidumbres. De manera general, algunos reportes mencionan que cada matriz debe ser pretratada adecuadamente.

Por ejemplo, en el caso de los suelos, se han empleado diversos solventes que se han comparado hexano ( $C_6H_{14}$ ) marcado por la NOM-138-SEMARNAT/SSA1-2012 (Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales & Secretaría de Salud [SEMARNAT], 2012a) y se ha encontrado que los solventes halogenados presentan mejores rendimientos. Además, se observó que los suelos arcillosos requieren mayor tiempo de tratamiento para mejorar los porcentajes de extracción en comparación que los arenosos. Así mismo, en el caso de los métodos espectrofotométricos, está demostrado que las absorptividades varían en función de los grupos funcionales presentes en la muestra, por lo que el procedimiento de cuantificación puede arrojar valor de concentración de hidrocarburos menores a los valores que se encuentran realmente en la muestra analizada.

Por estas razones, en este trabajo se propone establecer un método analítico para la cuantificación de hidrocarburos (fracciones media y pesada, así como diésel), empleando espectrofotometría UV-Vis, validando el procedimiento con matrices líquidas contaminadas experimentalmente y estimar los errores, para finalmente realizar la determinación de hidrocarburos en un extracto acuoso siguiendo el método especificado en la normativa.

## 2. Marco teórico

### 2.1. Antecedentes

La espectrofotometría UV-Vis representa una técnica analítica robusta para poder implementar metodologías para la cuantificación de diversos analitos en matrices complejas, como es el caso de los hidrocarburos en suelos. Para poder tener un método confiable se realizó la investigación de diferentes reportes que han realizado diferentes métodos de extracción de HTP, en suelos y aguas contaminadas utilizando diferentes métodos para poder comparar los resultados obtenidos y poder validar el método que está siendo desarrollado en este trabajo.

En este estudio (Cloarec *et al.*, 2002), evaluó la aplicación de la técnica UV-Vis para la determinación de hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) en estudios de campo debido a su robustez y facilidad de uso, además, cuando se utilizan con métodos de calibración multivariada como la regresión de componentes principales, pueden predecir con precisión la concentración global de HAP en suelos.

Hidalgo, (2006) Desarrolló un método para detectar contaminantes orgánicos en el agua mediante la contaminación artificial de muestras de agua desmineralizada con petróleo y sus derivados. Se cuantificaron los grupos cromóforos presentes en las muestras, concluyendo que el método permite detectar cualitativamente, de manera presuntiva, la presencia de grupos de hidrocarburos aromáticos, olefinas conjugadas y heteroátomos como oxígeno y azufre. Sin embargo, dado que las lecturas se realizan a una longitud de onda de 450 nm, el método no puede detectar hidrocarburos totales, sino solo los grupos que absorben en esa longitud. Para una identificación completa, el método necesita el apoyo de otros datos analíticos. Se demostró la proporcionalidad entre la absorbancia y la concentración de grupos cromóforos absorbentes, según la Ley de Lambert-Beer, y se resaltó la necesidad de elaborar una curva de calibración específica con el combustible o aceite en estudio.

Villa *et al.*, (2016) implementaron un método para el análisis de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH) con el objetivo de estandarizar y validar una técnica analítica para su determinación en muestras reales de agua. Utilizando espectroscopía ultravioleta y cromatografía líquida de alta eficiencia con detección UV-FLD, el estudio buscó demostrar la eficacia de esta técnica en la determinación y cuantificación de la concentración total de PAH en muestras reales. Lograron determinar y cuantificar efectivamente la concentración total de PAH en muestras aleatorias del río Cauca a su paso por el municipio de Popayán. Se establecieron límites de detección y cuantificación para el Fenantreno y Benzo[a]pireno utilizando el detector FLD. La técnica analítica demostró ser efectiva en la determinación y cuantificación de los PAH en las muestras de agua.

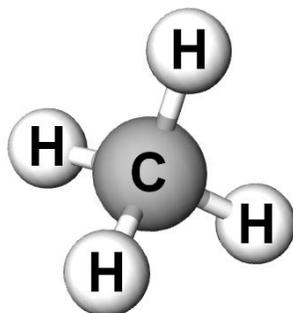
La contaminación de suelos y agua por compuestos hidrofóbicos es un problema ambiental actual. Se mencionan diversas tecnologías para remediar suelos contaminados, entre ellas la remediación mejorada por surfactantes. Esta técnica se basa en la solubilización del contaminante por las micelas del surfactante y la movilización del contaminante adsorbido hacia la solución. Se discute cómo las mezclas de surfactantes aniónicos y no iónicos pueden ser más efectivas que los surfactantes individuales para la remediación de suelos contaminados por hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs). Además, se señala que el comportamiento de los surfactantes en el suelo no es bien conocido, y se han estudiado la adsorción de diferentes surfactantes en distintos modelos de suelos. (Chino, 2018).

En una tesis reciente Aguijo Portillo *et al.*, (2019) reportaron un método para determinar y validar los hidrocarburos totales del petróleo, el estudio propone estrategias de validación interna y externa de modelos de calibración lineal simple (MCLS) para determinar hidrocarburos totales del petróleo (HTP) mediante espectrometría ultravioleta-visible (UV-Vis). Se construyeron y validaron cuatro modelos, demostrando en todos los casos la linealidad y robustez de los MCLS en el rango estudiado. En los modelos calibrados se identificó el efecto matricial debido al tipo de disolvente usado para diluir los hidrocarburos y por el tipo de hidrocarburo, lo cual influyó en los límites de detección y cuantificación.

Un caso especial son los hidrocarburos aromáticos policíclicos que son contaminantes cancerígenos son extremadamente hidrofóbicos por naturaleza y resistentes a la degradación biológica, la extracción de HAPs de matrices ambientales es el primer y más crucial paso en la cuantificación, debido a sus estructura no polares, los HAPs pueden ser absorbidos en la materia orgánica de los suelos y sedimentos, por ello Kariyawasam *et al.*, (2022) realizaron un reporte en donde proponen mejorar las técnicas ya establecidas utilizan solventes orgánicos y en las técnicas recientes se busca reducir el uso de estos reemplazándolos con biosurfactantes.

## 2.2. Hidrocarburos

Los hidrocarburos totales del petróleo (HTP), constituidos por carbono e hidrógeno, se definen comúnmente en la práctica como el petróleo y el gas natural, dado que son una combinación de varios de estos compuestos que estructuralmente están formados por cadenas hidrocarbonadas. El metano ( $\text{CH}_4$ ) representa el hidrocarburo más elemental, compuesto por un solo átomo de carbono y cuatro de hidrógeno (**figura 1**). El gas natural consiste principalmente en hidrocarburos de menor peso molecular, mientras que el petróleo se compone de mezclas de hidrocarburos con cadenas más largas de carbono e hidrógeno. La densidad ( $\rho$ ) de los diferentes tipos de petróleos crudos oscila entre 0.7 y 1 (g/mL), aunque es más común expresar este parámetro en grados API (American Petroleum Institute) cuyos valores van desde 70 a 5 (Herrera Herbert, 2020).



**Figura 1. Estructura del metano, C: Carbono, H: Hidrógeno.** Fuente construcción propia.

Los hidrocarburos (HC) se dividen en diferentes familias químicas dada su estructura. Estas estructuras son basadas en la tetravalencia del carbono (Jean-Pierre Wauquier, 2004).

### 2.2.1. Hidrocarburos alifáticos saturados: alcanos o parafinas.

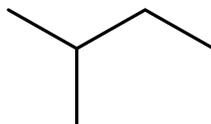
Son cadenas de átomos de carbono enlazadas en donde cada átomo de este elemento está ligado a otros cuatro átomos (C o H) (Jean-Pierre Wauquier, 2004).. La fórmula general de los alcanos es:



Se denominan parafinas normales o n-alcanos, a aquellos hidrocarburos en donde las cadenas de carbono son lineales, su fórmula semidesarrollada es:



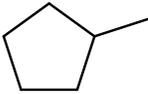
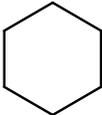
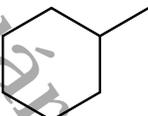
Las isoparafinas o isoalcanos, son cadenas donde los átomos de hidrógeno pueden ser sustituidos por carbonos o cadenas hidrocarbonadas, generando ramificaciones en la cadena, como se muestra en la **figura 2** (Jean-Pierre Wauquier, 2004).



**Figura 2. Estructura de un isoalcano: isopentano.** (Jean-Pierre Wauquier, 2004).

### 2.2.2. Hidrocarburos cíclicos saturados, cicloalcanos o naftenos.

Estos hidrocarburos presentan una ciclación total o parcial del esqueleto carbonado, y el número de átomos en los ciclos puede variar. En los petróleos crudos, los anillos de cinco o seis átomos son más comunes, y cada átomo de hidrógeno puede ser sustituido por cadenas parafínicas rectas o ramificadas, un proceso conocido como alquilación. (Jean-Pierre Wauquier, 2004).

	Fórmula empírica	Fórmula desarrollada	Peso molecular	Temperatura de ebullición °C (1 arm)	$d_4^{15}$ (líquido)
Ciclopentano	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>		70.1	49.3	0.750
Metilciclopentano	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>		84.2	72.0	0.753
Ciclohexano	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>		84.2	80.7	0.783
Metilciclohexano	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>		98.2	100.9	0.774

**Tabla 1. Constantes físicas de algunos cicloalcanos.** (A partir de: J.P. Wauquier, 2004).

La fórmula general para cicloalcanos de un ciclo es C<sub>n</sub>H<sub>2n</sub>. Del mismo modo también se encuentran cicloalcanos de 2,3,4 o más anillos fusionados, por ejemplo, la decalina (**figura 3**), formada por dos anillos condensados.

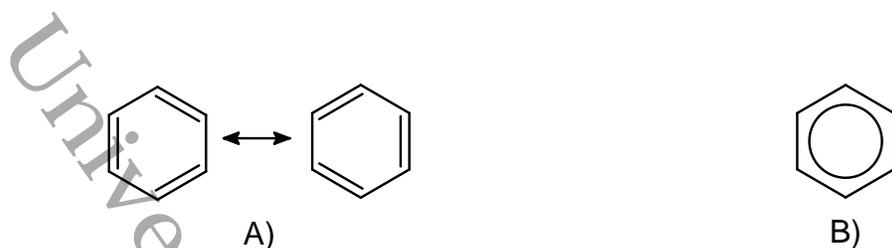


**Figura 3. Estructura de la decalina.** Fuente construcción propia.

### 2.2.3. Hidrocarburos aromáticos.

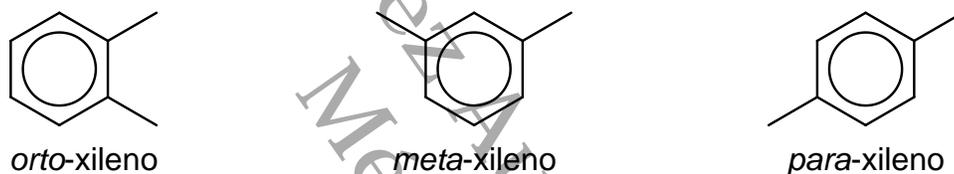
Los hidrocarburos cíclicos poliinsaturados se presentan en mayor proporción en los crudos del petróleo. La presencia de dobles enlaces conjugados en sistemas de uno o más ciclos fusionados proporciona características fundamentales para aplicación en la petroquímica (por ejemplo: benceno, tolueno o xilenos), además de contribuir al aumento de número de octano de las gasolinas. Los homólogos superiores, por su parte, contribuyen a problemas del medio ambiente, sanidad pública, deterioro de catalizadores, entre otros, además de ser formadores de coque (Jean-Pierre Wauquier, 2004).

El compuesto representativo de los HC aromáticos es el Benceno, cuyas representaciones de Kekulé se presentan en la **figura 4 A** aunque comúnmente se representa como el híbrido de resonancia como se muestra en la **figura 4 B**.



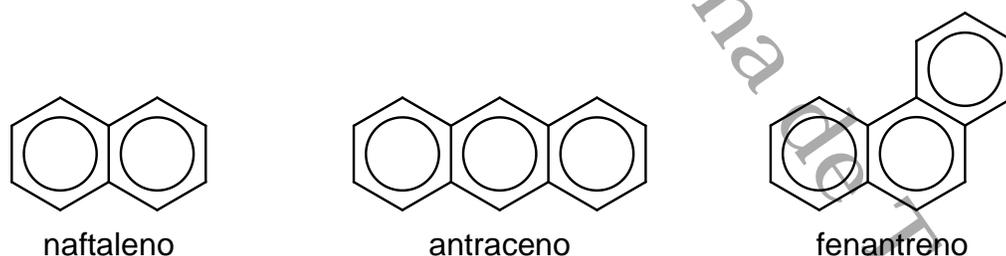
**Figura 4. A) Estructuras resonantes de Kekulé para el benceno, B) Representación del híbrido de resonancia del benceno.** Fuente construcción propia.

En el benceno, los átomos de hidrogeno pueden ser sustituidos, como en el caso de los derivados alquilaromáticos. En el caso de que se presenten dos sustituyentes dentro del anillo de benceno, se tiene la posibilidad de encontrar isómeros la posición relativa de sus sustituyentes: *orto* (posición relativa 1,2), *meta* (posición relativa 1,3) y *para* (posición relativa 1,4), por ejemplo, el caso de los dimetilbencenos conocidos como xilenos y cuyas estructuras se presentan en la **figura 5** (Jean-Pierre Wauquier, 2004).



**Figura 5. Estructuras de los tres isómeros del dimetilbenceno (xileno).** Fuente construcción propia.

También es posible la fusión de dos o más anillos de benceno, generando los hidrocarburos policíclicos aromáticos, ejemplos de los cuales se muestran en la **figura 6**.



**Figura 6. Estructuras de hidrocarburos policíclicos aromáticos representativos**

#### 2.2.4. Hidrocarburos alifáticos insaturados, olefinas o alquenos

Esta familia se caracteriza por la presencia de enlaces dobles carbono-carbono, lo que da lugar a la formación de isómeros tanto de posición como de orientación del doble enlace, como es el caso de: but-1-eno 1, *cis*-but-2-eno 2, *trans*-but-2-eno 2 e *iso*-buteno. En la **tabla 2** se presentan constantes físicas de alquenos selectos. Cabe señalar que Las olefinas son escasas en el petróleo crudo o

productos de destilación directa, pero son un subproducto de la refinación de fracciones pesadas (Jean-Pierre Wauquier, 2004).

	Fórmula empírica	Fórmula desarrollada	Peso molecular	Temperatura de ebullición °C (1 arm)	$d_4^{14}$ (líquido)
Etileno	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>		28.0	-103.7	
Propileno	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>		42.1	-47.7	0.523
But-1-eno	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>		56.1	-6.3	0.601
cis-but-2-eno	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>		56.1	3.7	0.627
trans-but-2-eno	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>		56.1	0.8	0.610
iso-buteno	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>		56.1	-6.9	0.601
Pent-1-eno	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>		70.1	30.0	0.646
But-1,3-dieno	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>		54.1	-4-4	0.627
Isopreno	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub>		68.1	34.1	0.686
Ciclopentadieno	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub>		66.0	40.0	

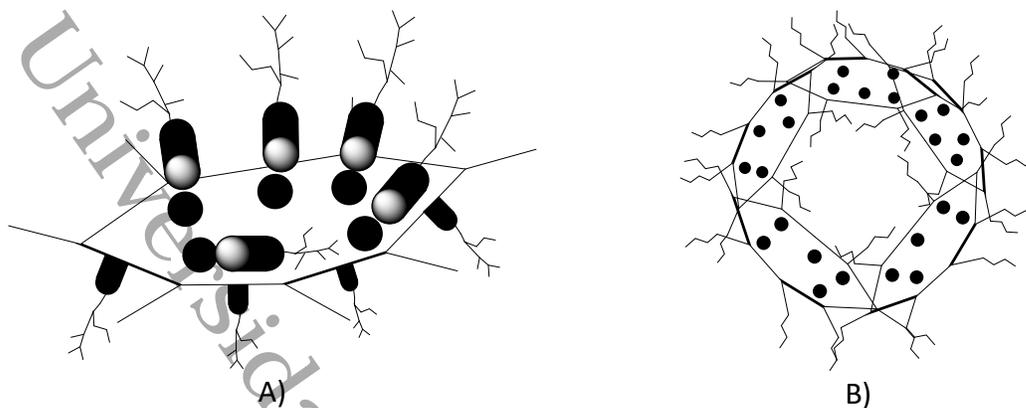
**Tabla 2. Constantes físicas de algunos hidrocarburos insaturados.** (A partir de: J.P. Wauquier, 2004).

### 2.2.5. Compuestos indefinidos químicamente

Debido a la complejidad de aislar y caracterizar con precisión las moléculas presentes en las fracciones más pesadas de los petróleos crudos, estas fracciones se separan en dos clases generales denominadas asfaltenos y resinas. Estas definiciones son operativas y no estructuralmente definidas (Jean-Pierre Wauquier, 2004).

#### 2.2.5.1. Asfaltenos

Están constituidos por laminas poliaromáticas condensadas, unidos por cadenas saturadas, enlazadas entre ellas por electrones  $\pi$  provenientes de los enlaces dobles de los anillos bencénicos, sus principales características son: sólidos negros, brillantes y tienen un peso molecular que va de 1000 a 100,000 g/mol, una representación general de los asfaltenos se presenta en la **figura 7** (Jean-Pierre Wauquier, 2004).

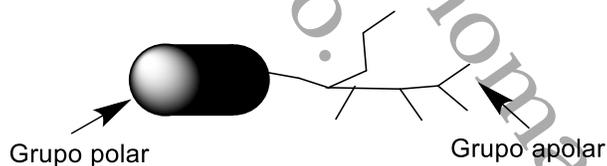


**Figura 7. Representación de moléculas de asfaltenos, estado coloidal (A) y micelar (B).** (A partir de: J.P. Wauquier, 2004).

Su estructura muestra que son relativamente polares debido a los anillos aromáticos y grupos funcionales, tienen partes apolares constituidas por cadenas alifáticas, lo que le confiere dualidad polaridad polar-apolar, dándole propiedades interfaciales.

#### 2.2.5.2. Resinas

Al hablar de asfaltenos, es necesario considerar también a las resinas (**figura 8**), ya que el comportamiento de los asfaltenos depende de la presencia de estas. Se considera que las resinas son un proceso intermedio en la formación del crudo en asfaltenos (Jean-Pierre Wauquier, 2004).



**Figura 8. Representación de una molécula de resina.** (A partir de: J.P. Wauquier, 2004).

Son moléculas con alta aromaticidad, contenido de heteroátomos (N, O, S, Ni y V) de peso molecular de 500 a 1000 g/mol.

#### 2.3. Grados API

La gravedad API, denominada así por el American Petroleum Institute, es una medida de  $\rho$  utilizada para determinar si el petróleo es más ligero o pesado en comparación con el agua. Si los grados API son superiores a 10, esto significa que el petróleo es más liviano que el agua y flotará sobre ella. Esta medida también se usa para comparar las densidades de las distintas fracciones del petróleo. Por ejemplo, si una fracción de petróleo flota sobre otra, esto indica que es más ligera y, por lo tanto, tiene una mayor gravedad API.

La gravedad API es una cantidad adimensional y se le agrega la denominación "grado API" al número obtenido mediante el cálculo mostrado en la ecuación 1. Para medir la gravedad API, se utiliza un instrumento llamado hidrómetro, el cual viene en diversas variantes.

$$API = \frac{141.5}{GE} - 131.5 \text{ a } 60^{\circ}F$$

GE = Gravedad Específica.

### Ecuación 1.

Y del mismo modo la gravedad específica está dada por la siguiente ecuación:

$$GE = \frac{\rho \text{ petróleo crudo}}{\rho \text{ Agua}}$$

GE = Gravedad Específica

$\rho$  = Densidad

### Ecuación 2.

Las gravedades se determinan a una temperatura de 60 °F (15.86 °C) o se convierten a valores equivalentes a 60 °F. Estas mediciones no se aplican a no hidrocarburos ni a hidrocarburos puros como los aromáticos.

TIPO DE CRUDO	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	GRAVEDAD API
Extrapesado	>1.0	10
Pesado	1.0 - 0.92	10.0 - 22.3
Mediano	0.92 - 0.87	22.3 - 31.1
Ligero	0.87 - 0.83	31.1 - 39
Superligero	<0.83	>39

**Tabla 3. Clasificación de los hidrocarburos según los °API.** (Wall Loya *et al.*, 2024).

### 3. Espectroscopía

Las mediciones basadas en la interacción de la materia con la luz visible u otras formas de radiación electromagnética son ampliamente utilizadas en química analítica. Estas interacciones entre radiación y materia son el enfoque principal de la ciencia de la espectroscopía. Los métodos espectroscópicos de análisis se basan en medir la cantidad de radiación producida o absorbida por moléculas o especies atómicas de interés. Es posible clasificar estos métodos según la región del espectro electromagnético que se utilice en la medición. Las regiones espectrales (**figura 9**) utilizadas incluyen rayos gamma ( $\gamma$ ), rayos X, ultravioleta (UV), visible (Vis), infrarroja (IR), microondas y radiofrecuencia (RF). En la práctica, el término espectroscopía se ha ampliado para incluir técnicas que no implican el uso de

radiación electromagnética, como la espectroscopía acústica, de masas y de electrones. (Skoog, 2014).

La espectroscopía ha jugado un papel crucial en el avance de la teoría atómica moderna. Además, los métodos espectroquímicos han ofrecido herramientas ampliamente utilizadas para descubrir estructuras moleculares y para la determinación tanto cualitativa como cuantitativa de compuestos orgánicos e inorgánicos. (Skoog, 2014).

Tipo de espectroscopia						
Rayos $\gamma$	Rayos X	Visible y ultravioleta	Infrarrojo	Microondas	REE	RMN
Número de onda, $\text{cm}^{-1}$	$10^9$	$10^8$	$10^4$	100	1	$10^{-2}$
Longitud de onda	100 pm	10 nm	1000 nm	100 $\mu\text{m}$	1 cm	100 cm
Frecuencia, Hz	$3 \times 10^{18}$	$3 \times 10^{16}$	$3 \times 10^{14}$	$3 \times 10^{12}$	$3 \times 10^{10}$	$3 \times 10^8$
Energía, J/mol	$10^9$	$10^7$	$10^5$	$10^3$	10	$10^{-1}$
Cambio de configuración nuclear		Cambio de distribución electrónica		Cambio de configuración	Cambio de orientación	Cambio de espín
Tipo de cambio cuántico						

Figura 9. Espectro electromagnético. A partir de (Skoog, 2014).

### 3.1.1. Espectroscopía ultravioleta-visible (UV-Vis).

La espectrofotometría UV-Vis es una técnica analítica que se utiliza para medir la absorción de la luz en el rango de longitudes de onda ultravioleta y visible. Esta técnica se basa en la capacidad de los compuestos para absorber la luz en un rango específico de longitudes de onda, que identifica y cuantifica los compuestos en una solución (Skoog, 2014).

Es una técnica de absorción de luz ultravioleta y visible por moléculas, lo que hace que un electrón se mueva de un orbital molecular de baja energía (HOMO) a uno excitado de mayor energía (LUMO). Esto implica transiciones de electrones de niveles de energía bajos a más altos, como entre orbitales enlazantes o pares de electrones libres y orbitales incompletos anti enlazantes (Skoog, 2014).

Se producen transiciones de electrones desde niveles de energía más bajos a niveles más altos, que ocurren entre un orbital enlazante o un par de electrones libres y un orbital anti-enlazante incompleto. La diferencia de energía entre estos orbitales moleculares corresponde a longitudes de onda (denotadas como  $\lambda$ ) en el espectro ultravioleta-visible (UV-Vis), que generalmente van desde aproximadamente 190 hasta 780 nm (Skoog, 2014).

En el espectro UV-Vis, generalmente se observan solo 2 o 3 bandas amplias y prominentes. Estas bandas son anchas debido a la presencia de múltiples niveles

energéticos accesibles para los electrones, influenciados por el entorno (vibraciones y/o rotaciones moleculares). Cada nivel energético, en realidad, consta de varios subniveles que permiten múltiples transiciones electrónicas. El espectrofotómetro detecta estas variaciones de absorción, aunque pequeñas, lo que resulta en la formación de una banda ancha en el espectro. En la lectura del espectrofotómetro, se indica la transmitancia máxima en lugar de proporcionar el valor exacto del intervalo de absorción (Skoog, 2014).

### 3.1.2. Tipos de electrones absorbentes.

Los electrones que contribuyen a la absorción en una molécula orgánica son aquellos que están involucrados directamente en la formación de enlaces entre átomos y que están asociados con más de un átomo, así como los electrones no enlazantes o externos que se encuentran alrededor de átomos como oxígeno, halógenos, azufre y nitrógeno (Skoog, 2014).

Los orbitales moleculares, que representan las distribuciones espaciales de los electrones en las moléculas, pueden considerarse como la suma de los orbitales atómicos enlazantes. Cuando dos orbitales atómicos se combinan, ocurre una transición del orbital molecular enlazante de baja energía y uno antienlazante de alta energía (**Tabla 4**) (Skoog, 2014). Los enlaces simples en una molécula orgánica se conocen como orbitales sigma ( $\sigma$ ), mientras que los enlaces dobles contienen un orbital sigma ( $\sigma$ ) asociado con un par de electrones de enlace y un orbital molecular pi ( $\pi$ ) asociado con el otro par. Los orbitales  $\pi$  se forman por superposición paralela de orbitales atómicos p y tienen una  $\rho$  de carga caracterizada por un plano nodal a lo largo del eje de enlace y una  $\rho$  máxima en las regiones por encima y por debajo del plano (Skoog, 2014).

Además de los orbitales  $\sigma$  y  $\pi$ , muchos compuestos orgánicos contienen electrones no enlazantes designados por el símbolo " $\eta$ ". Las energías de estos diferentes tipos de orbitales moleculares difieren significativamente, y pueden ocurrir transiciones electrónicas entre ciertos niveles de energía a través de la absorción de radiación, lo cual se refleja en una constante que se define como absorptividad molar ( $\epsilon$ ) lo cual se define más adelante (Skoog, 2014).

Transición	$\lambda$ (nm)	$\epsilon$ (L mol <sup>-1</sup> cm <sup>-1</sup> )	Ejemplo
$\sigma \rightarrow \sigma^*$	<200	-	Hidrocarburos saturados
$\pi \rightarrow \pi^*$	200 – 500	$\cong 10^4$	Alquenos, alquinos aromáticos
$\eta \rightarrow \sigma^*$	160 – 260	$10^2 - 10^3$	H <sub>2</sub> O, CH <sub>3</sub> OH, CH <sub>3</sub> CL
$\eta \rightarrow \pi^*$	250 – 600	$10 - 10^3$	Carbonilos, nitro, nitrato, carbonilo.

**Tabla 4. Características de transiciones electrónicas entre orbitales  $\sigma$ ,  $\pi$  y  $\eta$ .** (Skoog, 2014).

### 3.1.3. Especies absorbentes.

La absorción de radiación ultravioleta o visible por una especie atómica o molecular "M" puede entenderse como un proceso de dos etapas. En la primera etapa, la especie "M" se excita electrónicamente al interactuar con un fotón de energía  $h\nu$ , donde  $J$  es la energía en Joules, representado en la ecuación 3:



**Ecuación 3.**

Aquí,  $M^*$  denota la especie excitada electrónicamente M.

El tiempo de vida de la especie excitada,  $M^*$ , es corto y oscila entre  $10^{-8}$  y  $10^{-9}$  segundos, y su existencia termina debido a varios procesos de relajación. El proceso de relajación más común implica la conversión de la energía de excitación en calor, que se expresa en la ecuación 4 como:



**Ecuación 4.**

La relajación también puede ocurrir a través de la descomposición de  $M^*$  que conduce a la formación de nuevas especies; este tipo de proceso se conoce como reacción fotoquímica. Por otro lado, la relajación puede implicar la reemisión de radiación en forma de fluorescencia o fosforescencia (Skoog, 2014).

Es importante señalar que el tiempo de vida de  $M^*$  es generalmente muy corto, lo que significa que su concentración en cualquier momento es mínima y puede considerarse despreciable (Skoog, 2014).

#### 3.1.3.1. Absorción de compuestos orgánicos.

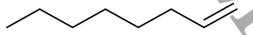
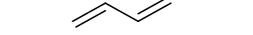
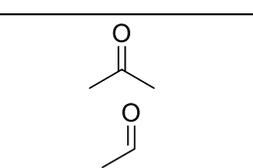
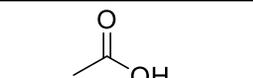
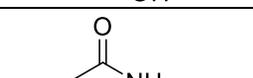
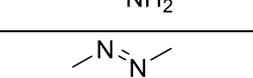
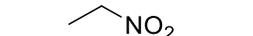
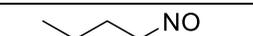
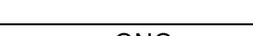
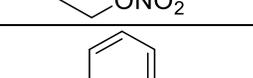
La longitud de onda a la que una molécula orgánica absorbe la radiación depende de la fuerza de sus enlaces electrónicos. Los enlaces sencillos carbono-carbono tienen electrones compartidos tan apretados que su excitación requiere energías correspondientes a longitudes de onda en la región ultravioleta, con longitudes de onda inferiores a 180 nm. Sin embargo, debido a las dificultades experimentales y la absorción de componentes atmosféricos y de cuarzo en esta región, los espectros de enlace simple no se utilizan con fines analíticos (Skoog, 2014).

Por otro lado, los electrones en los enlaces dobles y triples de las moléculas orgánicas se mantienen menos apretados y son excitados más fácilmente por la radiación. Las especies con enlaces insaturados exhiben picos de absorción útiles. Estos grupos funcionales orgánicos insaturados que absorben en las regiones UV-Vis se denominan cromóforos. Sirven como una guía aproximada para la identificación de compuestos y se ven afectados por los efectos de los solventes y otros detalles estructurales (Skoog, 2014).

La conjugación entre dos o más cromóforos puede provocar cambios en los máximos de absorción hacia longitudes de onda más largas. Los efectos vibratorios también amplifican los picos de absorción, lo que dificulta la determinación exacta de un máximo de absorción (Skoog, 2014).

En compuestos orgánicos saturados que contienen heteroátomos como oxígeno, nitrógeno, azufre o halógenos, sus electrones no compartidos pueden ser excitados por radiación en el rango de longitud de onda de 170 a 250 nm. Algunos disolventes comunes, como alcoholes y éteres, absorben en esta región del espectro, lo cual dificulta la medición de la absorción de analitos disueltos en ellos a longitudes de onda menores a 180 a 200 nm. Esta región a veces se emplea para determinar compuestos que contienen halógenos y azufre (Skoog, 2014).

Las mediciones espectrofotométricas utilizando radiación UV-VIS son efectivas para detectar grupos cromóforos, dado que las moléculas grandes, incluso las más complejas, son transparentes a longitudes de onda mayores a 180 nm. La presencia de uno o más picos en el rango de 200 a 400 nm indica claramente la presencia de grupos insaturados o de átomos como azufre o halógenos. (Skoog, 2014).

Cromóforo	Ejemplo	Disolvente	$\lambda_{\text{máx}}$ (nm)	$\epsilon_{\text{máx}}$	Tipo de transición
Alqueno		n-Heptano	177	13000	$\pi \rightarrow \pi^*$
Alqueno conjugado		n-Heptano	217	21000	
Alquino		n-Heptano	178 196 225	10000 2000 160	$\pi \rightarrow \pi^*$ - -
Carbonilo		n-Hexano n-Hexano	186 280 180 293	1000 16 Larga 12	$n \rightarrow \sigma^*$ $n \rightarrow n^*$ $n \rightarrow \sigma^*$ $n \rightarrow \pi^*$
Carboxilo		Etanol	204	41	$n \rightarrow \pi^*$
Amido		Agua	214	60	$n \rightarrow \pi^*$
Azo		Etanol	339	5	$n \rightarrow \pi^*$
Nitro		Iso-octano	280	22	$n \rightarrow \pi^*$
Nitroso		Éter etílico	300 665	100 20	- $n \rightarrow \pi^*$
Nitrato		Dioxano	270	12	$n \rightarrow \pi^*$
Aromático		n-Hexano	204 256	7900 200	$n \rightarrow \pi^*$

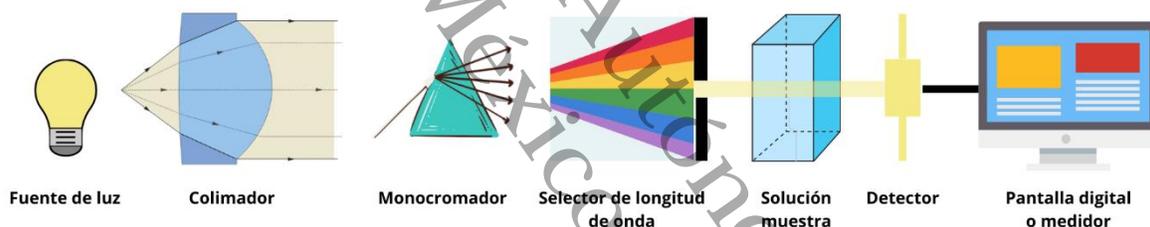
**Tabla 5. Características de absorción de algunos cromóforos comunes.** A partir de Skoog, (2014).

La espectroscopía de absorción molecular es una herramienta valiosa para la identificación de grupos funcionales dentro de una molécula. No obstante, su principal utilidad radica en las aplicaciones para la determinación cuantitativa de compuestos que contienen grupos absorbentes (Skoog, 2014).

Es crucial mencionar que los espectros UV-VIS no ofrecen una estructura lo bastante detallada para permitir una identificación inequívoca del analito. Por tanto, los datos cualitativos obtenidos mediante espectroscopía ultravioleta deben complementarse con otros datos físicos o químicos, como espectros infrarrojos, resonancia magnética nuclear, espectrometría de masas, así como información sobre solubilidad, puntos de fusión y ebullición (Skoog, 2014)

### 3.2. Medición de absorbancia.

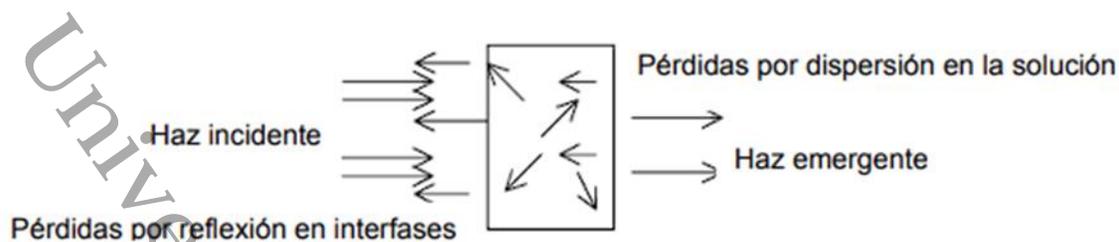
La transmitancia y la absorbancia son medidas que se obtienen mediante el uso de un instrumento llamado espectrofotómetro. Este dispositivo se utiliza para analizar la cantidad de luz que es absorbida por una muestra en el rango de longitudes de onda ultravioleta y visible. Para realizar la medición, la muestra del analito se coloca en un recipiente transparente, que puede ser un tubo o una celda. Este recipiente permite que pase la luz a través de la muestra y luego se registra la cantidad de luz que ha sido absorbida por el analito (**figura 10**).



**Figura 10. Componentes básicos del espectrofotómetro.** (A partir de Quesada Mora, 2007)

La transmitancia se refiere a la cantidad de luz que pasa a través de la muestra y no ha sido absorbida. Se expresa como un porcentaje y generalmente se utiliza para cuantificar la cantidad de luz que ha sido transmitida a través de la muestra.

La absorbancia, por otro lado, es una medida inversa de la transmitancia y se relaciona con la cantidad de luz que ha sido absorbida por el analito. La absorbancia se calcula utilizando la ley de Lambert-Beer, que establece una relación lineal entre la absorbancia y la concentración del analito en la muestra.



**Figura 11. Comportamiento de un haz incidente sobre una celda.** (Skoog, 2014)

Se observa que en el análisis espectrofotométrico ocurren reflexiones en las interfaces, tanto entre el aire y la pared del recipiente como entre la pared y la solución. Estas reflexiones contribuyen a una atenuación del haz de luz incidente (**figura 11**). Además, el haz puede perder intensidad debido a la dispersión de moléculas grandes en la solución y, en ocasiones, por la absorción en las paredes del recipiente. En conjunto, la transmitancia y la absorbancia proporcionan información valiosa sobre la concentración y las características de la muestra analizada, lo que es esencial para una variedad de aplicaciones en química analítica, bioquímica, farmacología y otras disciplinas científicas (Skoog, 2014).

### 3.3. Aspectos cuantitativos de las mediciones de absorción.

#### 3.3.1. Ley de Lambert-Beer.

La Ley de Lambert-Beer (Ley de Beer) establece la relación entre el poder de radiación de la luz incidente y el poder de radiación de la luz transmitida a través de una muestra absorbente. Esta relación depende tanto de la longitud del camino óptico (espesor de la muestra) como de la concentración de la especie absorbente presente en la muestra. Matemáticamente, la Ley de Lambert-Beer se expresa en la ecuación 5 (Skoog, 2014):

$$A = \varepsilon * c * l$$

**Ecuación 5**

Donde:

- A representa la absorbancia de la muestra, que es una medida adimensional de la cantidad de luz absorbida por la muestra.
- $\varepsilon$  (épsilon) es el coeficiente de absorción molar, que es una constante para cada especie absorbente y se expresa en L/mol\*cm. Representa la capacidad de la especie absorbente para absorber la luz a una determinada longitud de onda.
- c es la concentración de la especie absorbente en la muestra y se expresa en mol/L.
- l es la longitud del camino óptico o espesor de la muestra a través de la cual la luz atraviesa. Se mide en centímetros.

La Ley de Lambert-Beer es fundamental para las determinaciones cuantitativas en espectrofotometría, ya que permite corregir la influencia de la concentración y otros factores operacionales al comparar distintos compuestos. Además, proporciona una base sólida para realizar mediciones cuantitativas en análisis espectrofotométricos (Skoog, 2014).

### 3.3.2. Absortividad y absortividad molar.

Según la Ley de Beer, se establece que la absorbancia es directamente proporcional al camino óptico  $b$  a través de la solución y a la concentración  $c$  de la especie absorbente. Estas relaciones se pueden expresar mediante la ecuación 6. (Skoog, 2014):

$$A = a * b * c$$

#### Ecuación 6

Donde  $a$  es una constante de proporcionalidad conocida como absortividad, la cual caracteriza la capacidad de absorción de la sustancia para cada longitud de onda. El valor de  $a$  depende de las unidades utilizadas para  $b$  y  $c$ . Comúnmente,  $b$  se mide en centímetros y  $c$  en gramos por litro, por lo tanto, la absortividad se expresa en unidades de  $L * g^{-1} * cm^{-1}$  (Skoog, 2014).

Cuando la concentración se expresa en moles por litro y la longitud de la celda en centímetros, la absortividad se denomina absortividad molar, se representa como  $\epsilon$ , y se mide en unidades de  $L * mol^{-1} * cm^{-1}$ . La absorbancia se expresa en la ecuación 7 como (Skoog, 2014):

$$A = \epsilon * b * c$$

#### Ecuación 7

### 3.3.3. Curva de calibración.

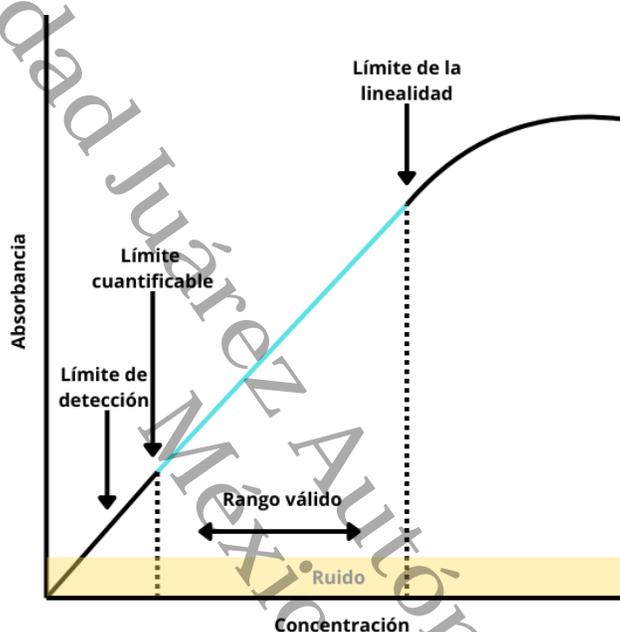
El espectro de una sustancia es la representación gráfica de la absorbancia (Abs) en relación con la longitud de onda ( $\lambda$ ). En este gráfico se pueden observar picos y valles que corresponden a máximos y mínimos de absorbancia en diferentes longitudes de onda (Skoog, 2014).

Para realizar determinaciones cuantitativas, típicamente se selecciona la longitud de onda donde se encuentra un máximo de absorbancia. Esto se debe a que en ese punto el error de medición es mínimo y la sensibilidad del espectrofotómetro es máxima (Skoog, 2014).

Para verificar el cumplimiento de la Ley de Beer, que relaciona la absorbancia con la concentración de la sustancia, se elabora una curva de calibración. Esta curva muestra la absorbancia (Abs) en función de la concentración (C) de la sustancia. Para construir esta curva, se preparan varias soluciones de la sustancia con concentraciones conocidas, y luego se mide la absorbancia de cada solución a

la longitud de onda seleccionada. La curva de calibración resultante ilustra cómo varía la absorbancia en relación con la concentración de la sustancia, lo que permite establecer una relación cuantitativa entre ambas. (Skoog, 2014).

La **figura 12** muestra un ejemplo de una curva de calibración típica obtenida en un espectrofotómetro. Esta curva es esencial para realizar análisis cuantitativos de muestras desconocidas, ya que permite determinar la concentración de una sustancia desconocida a partir de su absorbancia medida en el mismo equipo y en la misma longitud de onda que se utilizó para la curva de calibración (Skoog, 2014).



**Figura 12. Curva de calibración.** Construcción propia.

### 3.3.4. Limitaciones a la aplicabilidad de la ley de Lambert-Beer.

Es cierto que en general, la absorbancia está relacionada linealmente con la longitud del camino óptico, lo que permite establecer una relación cuantitativa entre la absorbancia y la concentración de una sustancia, como lo expresa la Ley de Lambert-Beer. Sin embargo, existen excepciones y desviaciones de esta proporcionalidad lineal entre la absorbancia medida y la concentración (Skoog, 2014).

En algunos casos, las desviaciones pueden surgir debido a la forma en que se realizan las mediciones de absorbancia. Por ejemplo, si la muestra tiene turbidez o contiene partículas suspendidas, la luz puede dispersarse y afectar la medida de absorbancia, lo que lleva a desviaciones de la relación lineal.

Además, ciertos cambios químicos pueden ocurrir en la muestra a medida que cambia su concentración, lo que altera la absorbancia y puede conducir a desviaciones de la relación lineal. Por ejemplo, en reacciones químicas que implican

cambios en el estado de oxidación o en el equilibrio entre especies químicas, la absorbancia puede no variar linealmente con la concentración (Skoog, 2014).

También pueden ocurrir desviaciones instrumentales, que están relacionadas con características o imperfecciones del propio espectrofotómetro utilizado para las mediciones. Estas desviaciones pueden ser el resultado de problemas en la calibración, estabilidad o sensibilidad del equipo, lo que afecta la precisión de las medidas y puede generar discrepancias en la relación entre absorbancia y concentración (Skoog, 2014).

#### **3.3.4.1. Limitaciones propias de la ley de Beer.**

Aunque la Ley de Beer es efectiva para describir el comportamiento de absorción en soluciones diluidas, a concentraciones más altas, típicamente superiores a 0.01 M, pueden surgir desviaciones de la relación lineal entre absorbancia y concentración debido a diversas interacciones y efectos (Skoog, 2014).

A concentraciones más altas, la distancia promedio entre las especies absorbentes se reduce, lo que permite que cada una afecte la distribución de cargas de las vecinas. Esta interacción entre las especies puede modificar su capacidad para absorber radiación a una longitud de onda específica, lo que conduce a desviaciones de la relación lineal. La magnitud de esta interacción varía con la concentración, por lo tanto, a concentraciones más altas, las desviaciones pueden ser más significativas (Skoog, 2014).

La presencia de otras especies en la solución, como electrolitos, también puede afectar la absorción de la especie absorbente debido a atracciones electrostáticas entre iones y moléculas. Este efecto se disminuye mediante la dilución de la solución (Skoog, 2014).

Además, las desviaciones de la Ley de Beer pueden surgir porque el coeficiente de absorción molar ( $\epsilon$ ) depende del índice de refracción de la solución. Si cambios en la concentración provocan alteraciones en el índice de refracción, se observarán desviaciones de la ley (Skoog, 2014).

Estas desviaciones y efectos intervinientes deben ser considerados al realizar mediciones cuantitativas en espectrofotometría, especialmente a concentraciones más altas, para garantizar resultados precisos y confiables. En ciertos casos, es posible que sea necesario diluir la muestra para reducir estas interacciones y obtener mediciones más cercanas a la proporcionalidad lineal entre absorbancia y concentración (Skoog, 2014).

#### **3.3.4.2. Desviaciones químicas aparentes.**

Estas desviaciones ocurren porque el analito puede disociarse, asociarse o reaccionar con el solvente para formar un producto, el cual tiene un espectro de absorción diferente al del analito original (Skoog, 2014).

### **3.3.4.3. Desviaciones instrumentales aparentes con radiación policromática.**

Las desviaciones instrumentales aparentes con la radiación policromática en espectrofotometría ocurren cuando la fuente de luz utilizada no emite radiación monocromática de una sola longitud de onda, sino que abarca un rango de longitudes de onda (policromática). Esto puede ocurrir, por ejemplo, con fuentes de luz como las lámparas de tungsteno que emiten una amplia gama de longitudes de onda en lugar de una sola (Skoog, 2014).

Cuando se utiliza una fuente de luz policromática, pueden surgir desviaciones en las mediciones de absorbancia, ya que las diferentes longitudes de onda interactúan con la muestra de manera diferente. Algunas longitudes de onda pueden ser más absorbidas por la muestra que otras, lo que afecta la medición de absorbancia general. Estas desviaciones pueden conducir a espectros de absorción más complejos y menos precisos (Skoog, 2014).

Para corregir estas desviaciones y obtener mediciones más precisas, se utilizan monocromadores en el espectrofotómetro. Los monocromadores son dispositivos que seleccionan una longitud de onda específica de la luz incidente y permiten que solo esa longitud de onda pase a través de la muestra. Mediante el uso de un monocromador, se puede obtener una medición más precisa de la absorbancia a una longitud de onda específica, eliminando las desviaciones causadas por la radiación policromática (Skoog, 2014).

### **3.4. Extracto PECT.**

La Prueba de Extracción para la Caracterización de Toxicidad (PECT) es un procedimiento de laboratorio utilizado para identificar los componentes de un residuo y determinar sus concentraciones, con el propósito de evaluar si el residuo representa un peligro debido a su toxicidad ambiental.

El procedimiento descrito en la NOM-053-SEMARNAT-1993 establece la metodología para extraer o lixiviar los compuestos de una muestra de residuo industrial, con el objetivo de realizar análisis cuantitativos para determinar la presencia de posibles compuestos tóxicos.

Se añaden dos nuevas definiciones: Constituyente Tóxico y Extracto PECT.:

- Constituyente Tóxico: Cualquier sustancia química en un residuo que lo hace peligroso debido a su toxicidad ambiental, aguda o crónica.
- Extracto PECT: El lixiviado usado para determinar los constituyentes tóxicos de un residuo y su concentración, con el objetivo de identificar si es peligroso por su toxicidad ambiental.

#### 4. Justificación

Los Hidrocarburos Totales del Petróleo (HTP) son una fuente de energía no renovable, se clasifican en fracciones “pesados, medianos y ligeros” en función de su  $\rho$  relativa, perteneciendo al grupo de energías fósiles y contaminantes. A medida que se ha aprovechado estos recursos se han presentado diversas dificultades como el derrame durante la extracción, accidentes o el robo de este recurso, propiciando a la contaminación del ambiente. Los suelos contaminados por hidrocarburos representan un problema ambiental al ecosistema ya que son acumulativos, afectando diversas propiedades del suelo tales como: Textura,  $\rho$  real,  $\rho$  aparente, capacidad de campo, pH, volviendo los suelos infértiles, propiciando la erosión debido a la falta de especies vegetales en estos, y las pocas especies vegetales que permanecen dan pie a la biomagnificación en la cadena trófica, llegando así hasta los seres humanos.

Los procesos de remediación requieren métodos analíticos que puedan ser fácilmente replicados para contar con datos que permitan establecer si el proceso de remediación es efectivo. En este sentido, los procedimientos espectrofotométricos Ultravioleta-Visible (UV-Vis) permiten determinar los HTP de manera cuantitativa, así mismo asegurando precisión, repetibilidad, reproducibilidad y rapidez. Siendo este un método accesible, en el presente trabajo se propone la construcción de curvas de calibración para diésel y las fracciones media y pesada de hidrocarburos, mediante la espectrofotometría UV-Vis, finalmente se busca evaluar extractos acuosos de suelos con el fin de determinar el contenido de HTP eficacia en muestras de laboratorio y muestras problema.

## **5. Pregunta de investigación**

¿Se puede realizar la determinación de HTP empleando la espectrofotometría UV-Vis en muestras contaminadas experimentalmente y reales?

## **6. Hipótesis**

Es posible contar con un método espectrofotométrico para cuantificar fracciones de hidrocarburos pesado, mediano y diésel en extractos acuosos PECT, Usando una curva de calibración para cada fracción analizada.

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.  
México.

## 7. Objetivos

### 7.1. General

Establecer un método analítico por espectrofotometría UV-Vis para la cuantificación de petróleo crudo de fracción mediana y pesada en suelos contaminados.

### 7.2. Específicos:

- Determinar los grados API de tres hidrocarburos.
- Construir curvas de calibración para cada hidrocarburo analizado y comparar si se ajustan o no a una misma tendencia.
- Normalizar las curvas de calibración empleando matrices líquidas contaminadas para estimar los errores experimentales.
- Determinar la concentración de hidrocarburos en extractos acuosos de suelos contaminados (PECT) empleando las curvas de calibración construidas.

## 8. Metodología

La **figura 13** presenta un esquema general de la metodología empleada en este trabajo.



**Figura 13. Esquema general de la metodología.** Construcción propia.

### 8.1. Determinación de °API

En este trabajo se utilizaron muestras de petróleo crudo, procedente del Activo de PEMEX “Cinco Presidentes”, localizado en el Municipio de Agua Dulce, Veracruz. De manera inicial se realizó la determinación de los °API, para la determinación de los grados API, se siguió la metodología reportada por Rueda-Beaurregard *et al.* (2023), el proceso general se describe a continuación.

1. Se emplearon matraces aforados de 10 mL con un peso constante.
2. Se procedió a pesar los matraces vacíos ( $m_1$ ).
3. Posteriormente, se agregó hidrocarburo a diferentes temperaturas en cada uno de ellos hasta alcanzar el aforo y se pesaron ( $m_2$ ) así obteniendo distintas masas a diferentes temperaturas ( $T$ ).
4. A partir de estos datos, se determinó la  $\rho$  específica:

$$(DE = (m_2 - m_1) / 10)$$

**Ecuación 8.**

y la  $\rho$  API:

$$((^\circ\text{API} = 141.5 / DE) - 131.5)$$

**Ecuación 9.**

5. Se realizó una regresión lineal entre la temperatura y la  $\rho$  API para obtener los valores reales de °API.

6. Con el fin de obtener una fórmula que relacionara los valores de °API de un hidrocarburo y los normalizara a la temperatura estándar (15.5°C), se restó este indicador a los valores de T (T-15.5).
7. Se contrastó el cociente de los valores de °API a diferentes temperaturas para obtener la fórmula de normalización deseada representado en la siguiente ecuación:

$$^{\circ}\text{API reales} = (^{\circ}\text{API observados} / ^{\circ}\text{API reales})$$

**Ecuación 10.**

## **8.2. Construcción curva de calibración**

Se realizaron curvas de calibración para cada una de las muestras patrón: fracción mediana, pesada y diésel. El procedimiento general fue el siguiente:

1. En primer lugar, se elaboraron muestras patrón de cada hidrocarburo.
2. Para ello, se prepararon tres disoluciones distintas: una que contenía 15 mg de cada petróleo crudo y una que contenía 45 mg de diésel, y cada una de estas soluciones se aforó con 50 mL de diclorometano (J.T. Baker ACS).
3. A continuación, se utilizaron estas soluciones patrón para preparar otras disoluciones con diferentes concentraciones mediante el método de proporción de masa (Ecuación 36, anexo 16.4), obteniendo 10 concentraciones distintas desde 300 a 30 mg/L para las fracciones de hidrocarburo mediano y pesado, y 9000 a 900 mg/L para el diésel.
4. Posteriormente, se llevaron a cabo barridos espectrales (n=3), empleando celdas de cuarzo de 1 cm de paso, en un equipo de marca Thermo Scientific modelo Genesys 10 UV que abarcaron el rango de 200 nm a 900 nm con lecturas con intervalo de 5 nm para encontrar la longitud de onda óptima de trabajo (Arguijo-Portillo *et al.*, 2019).
5. Las curvas de calibración para cada hidrocarburo se elaboraron utilizando la longitud de onda óptima de trabajo y se realizó el análisis de las muestras con la longitud de onda seleccionada.

## **8.3. Construcción y normalización de las curvas**

Para la validación de las curvas de calibración, se utilizó el espectrofotómetro UV-Vis se utilizaron muestras problema estandarizadas, las cuales fueron analizadas en las mismas condiciones en las que se corrieron las curvas de calibración, tal y como se describe a continuación:

1. Se preparó una solución de Acetato de Sodio (1M) en 500 mL y en otro recipiente se tuvo agua destilada.

2. Se pesaron 125mg de Hidrocarburo de fracciones media, pesada y Diesel.
3. Se prepararon las soluciones problema agregando el Hidrocarburo y Diesel a 250mL de solución de Acetato de Sodio y agua, para obtener un patrón de 500 mg/L.
4. Se tomaron diferentes alícuotas del patrón para realizar una dilución directa 9:1 disminuyendo en 50 mg/L para obtener 10 puntos.
5. Se tomaron alícuotas de 10mL de las diluciones para realizar una extracción del Hidrocarburo o Diesel de la fase acuosa con Diclorometano.
6. Una vez realizada la extracción de la fase acuosa, se almacenó el Diclorometano en matraces aforados de 10mL y se dejó evaporar el solvente.
7. Ya evaporado el solvente, se volvió a aforar con Diclorometano el extracto de Hidrocarburo o Diesel y se examinó con espectrofotometría UV-Vis.
8. Se utilizó la curva de calibración para comprobar la concentración de los extractos.

#### **8.4. Tratamiento PECT**

El método de cuantificación se aplicó sobre muestras problema siguiendo la metodología de la Norma Oficial Mexicana 053-SEMARNAT-IMSS-1998, realizando el extracto PECT de la siguiente forma:

1. Se preparó una solución de hidróxido de sodio (NaOH) a 1N y se añadieron 5.7 mL de ácido acético glacial (CH<sub>3</sub>COOH) en 500 mL de agua desionizada en un recipiente. Luego, se adicionaron 64.3 mL de NaOH (1N) al recipiente. Ambas soluciones se depositaron en un matraz aforado de 1000 mL. Se verificó que el extracto tuviera un pH de  $4.93 \pm 0.05$ .
2. Se pesaron 5 g de cada suelo: Suelo contaminado fresco y Suelo contaminado Intemperizado en matraces Erlenmeyer, respectivamente. A cada matraz se le adicionaron 50 mL del reactivo de extracción (n=3). Se agitó cada matraz por 30 min en el multiagitador a 180 rpm.
3. Después de transcurrido el tiempo de agitación, se retiraron los matraces del agitador para regular el pH de acuerdo con la norma (entre 4.88 y 4.98). Una vez regulado, se dejaron las muestras agitando en el multiagitador New Brunswick durante  $18 \pm 2$  h a 80 rpm.
4. Terminado el tiempo de agitación, se procedió a filtrar cada muestra utilizando papel filtro Whatman de N° 42 y un embudo de fibra de vidrio. Cada extracto filtrado se vertió en un matraz limpio.

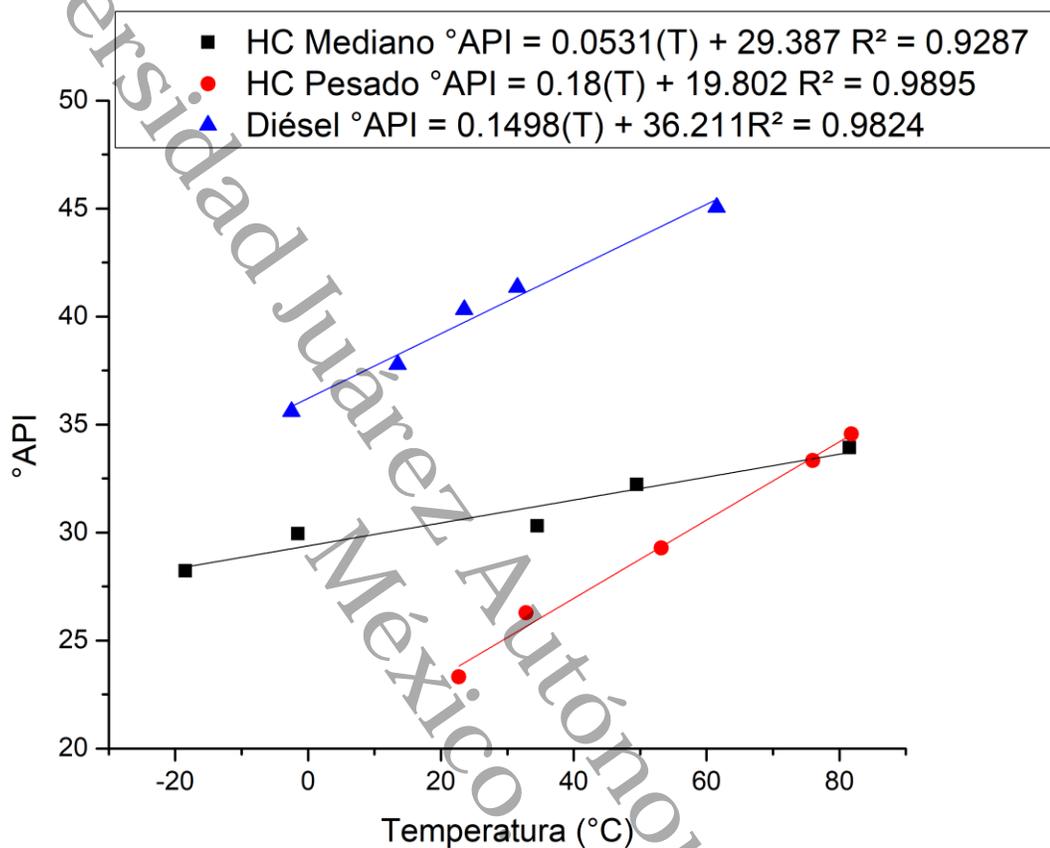
5. Para la extracción líquido-líquido, se recuperó el extracto previamente filtrado en un matraz y se tomaron aproximadamente 50 mL de extracto PECT. En un embudo de separación, se agregaron 15 mL de diclorometano y 15 mL de extracto PECT, manteniendo una relación de 1:1 en la extracción líquido-líquido. Los 15 mL de diclorometano se agregaron en dos tiempos, primero 10 mL y luego 5 mL, con el fin de asegurar una mejor extracción de los HTP.

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.  
México.

## 9. Resultados y discusiones

### 9.1. Determinación de grados °API

Se realizaron las mediciones de las fracciones de hidrocarburo y diésel por método directo para determinar los °API de estos (figura 14).



**Figura 14. Determinación de °API por método directo.** Construcción propia

Se obtuvieron las siguientes ecuaciones para calcular °API:

$$\text{HC mediano } ^{\circ}\text{API} = 0.0531(T) + 29.387$$

**Ecuación 11.**

$$\text{HC pesado } ^{\circ}\text{API} = 0.18(T) + 19.802$$

**Ecuación 12.**

$$\text{Diésel } ^{\circ}\text{API} = 0.1498(T) + 36.211$$

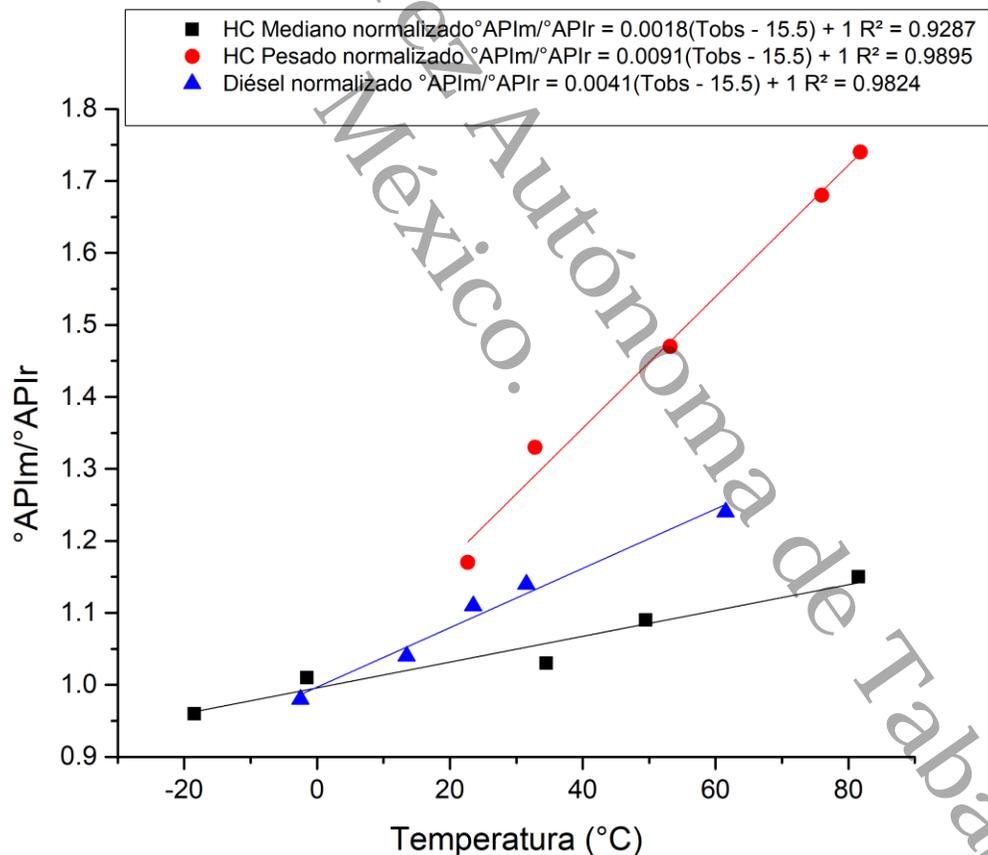
**Ecuación 13.**

Los °API de la fracción mediana tiene 29.387 °API, la fracción pesada 19.802 y el diésel 36.211 °API estos valores de °API se encuentran en los valores

establecidos para las distintas fracciones del petróleo (**Tabla 3**). Se considera la ordenada al origen como los °API, debido a que se mide a la temperatura de 60°F o 15.5°C establecido en la ASTM D 287–92, el valor de x (T-15.5) es igual a cero la pendiente es descartada, dando la intersección en el eje Y como el valor de los °API.

### 9.1.1. Complemento del análisis para establecer curvas normalizadas

Para descartar errores de medición se normalizaron las curvas de los °API, dividiendo los valores calculados (**anexo 16.1**), con la fórmula de la  $\rho$  API con los valores °API obtenidos en las mediciones, para así obtener las fórmulas de normalización deseadas, las cuales pueden emplearse en muestras que procedan de campo y lleguen al laboratorio para su análisis. En este sentido, las ecuaciones 17, 18 y 19 permiten tener una medición confiable a cualquier temperatura de las muestras analizadas. Con las ecuaciones obtenidas se pueden medir las fracciones hidrocarburo y obtener la gravedad API correspondiente, sin necesidad de construir curvas otra vez.



**Figura 15. °API normalizados.** Construcción propia.

Con los °API normalizados, obtenemos las siguientes ecuaciones:

$$\text{HC mediano } \frac{^{\circ}\text{API}_m}{^{\circ}\text{API}_r} = 0.0018(T_m - 15.5) + 1$$

**Ecuación 14.**

$$\text{HC pesado } \frac{^{\circ}\text{API}_m}{^{\circ}\text{API}_r} = 0.0091(T_m - 15.5) + 1$$

**Ecuación 15.**

$$\text{Diésel } \frac{^{\circ}\text{API}_m}{^{\circ}\text{API}_r} = 0.0041(T_m - 15.5) + 1$$

**Ecuación 16.**

A partir de las ecuaciones 14 a 16 se despejan las ecuaciones para obtener  $^{\circ}\text{API}_r$

$$\text{HC mediano } ^{\circ}\text{API}_r = \frac{^{\circ}\text{API}_m}{0.0018(T_m - 15.5) + 1}$$

**Ecuación 17.**

$$\text{HC pesado } ^{\circ}\text{API}_r = \frac{^{\circ}\text{API}_m}{0.0091(T_m - 15.5) + 1}$$

**Ecuación 18.**

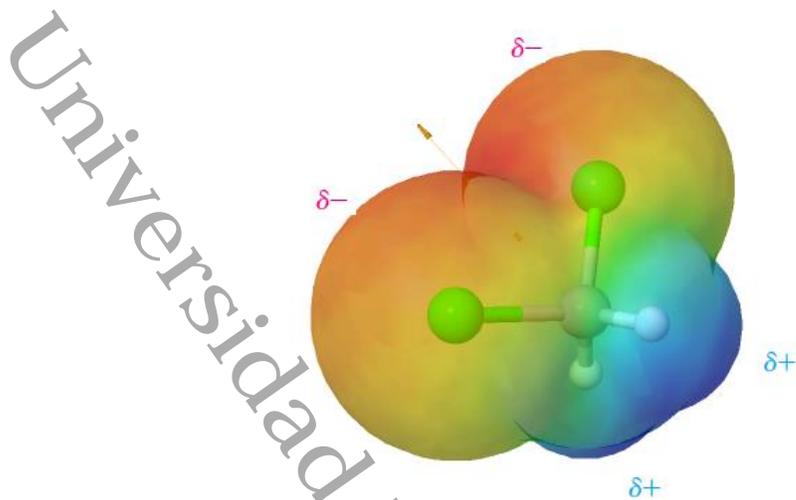
$$\text{Diésel } ^{\circ}\text{API}_r = \frac{^{\circ}\text{API}_m}{0.0041(T_m - 15.5) + 1}$$

**Ecuación 19.**

## 9.2. Construcción de las curvas de calibración

### 9.2.1. Selección del solvente

Para la construcción de las curvas se utilizó como solvente el diclorometano ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ), aunque la norma (ASTM International, 2003) establezca el uso de hexano y solventes no interfieren con la longitud de onda del analito siendo para el diclorometano a 233 nm y el hexano a 195 nm (Cromlab-instruments, 2024.), en Martínez-Chávez *et al.*, (2017) se reportó que tiene una mayor eficiencia para solvatar y estabilizar cargas contra el hexano, aunque ambos solventes son no polares, el diclorometano tiene un momento dipolar conferido por los átomos de cloro (Cl) presentes en el compuesto (**figura 16**), siendo este el mejor solvente para realizar las curvas de calibración, lo cual coincide con algunos autores como (Pons-Jiménez *et al.*, 2011; & Yzquierdo-Ruiz *et al.*, 2022)



**Figura 16. Representación del momento dipolar del diclorometano ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ).** Construcción propia.

En la **figura 16**, el cloro está representado en verde, el carbono en gris y el hidrógeno en blanco, los símbolos  $\delta^+$  y  $\delta^-$  representan respectivamente la carga eléctrica positiva y la carga eléctrica negativa dentro de la molécula.

#### 12.2.2 Estandarización del método

Se preparó el conjunto de soluciones estándar de acuerdo con lo que se describió en la metodología, obteniendo el siguiente rango de concentraciones 300-30 mg/L en las fracciones de hidrocarburos pesados y medianos, en el caso del diésel fue desde 9000 a 900 mg/L para seleccionar la región espectral de este estudio se realizó un análisis preliminar mediante un barrido en el espectro UV-Vis desde 200 hasta 900nm con concentraciones de 17600 a 34.375 mg/L para la fracción mediana, pesada y diésel, Como se presenta en las **figuras 17 A, B y C**.

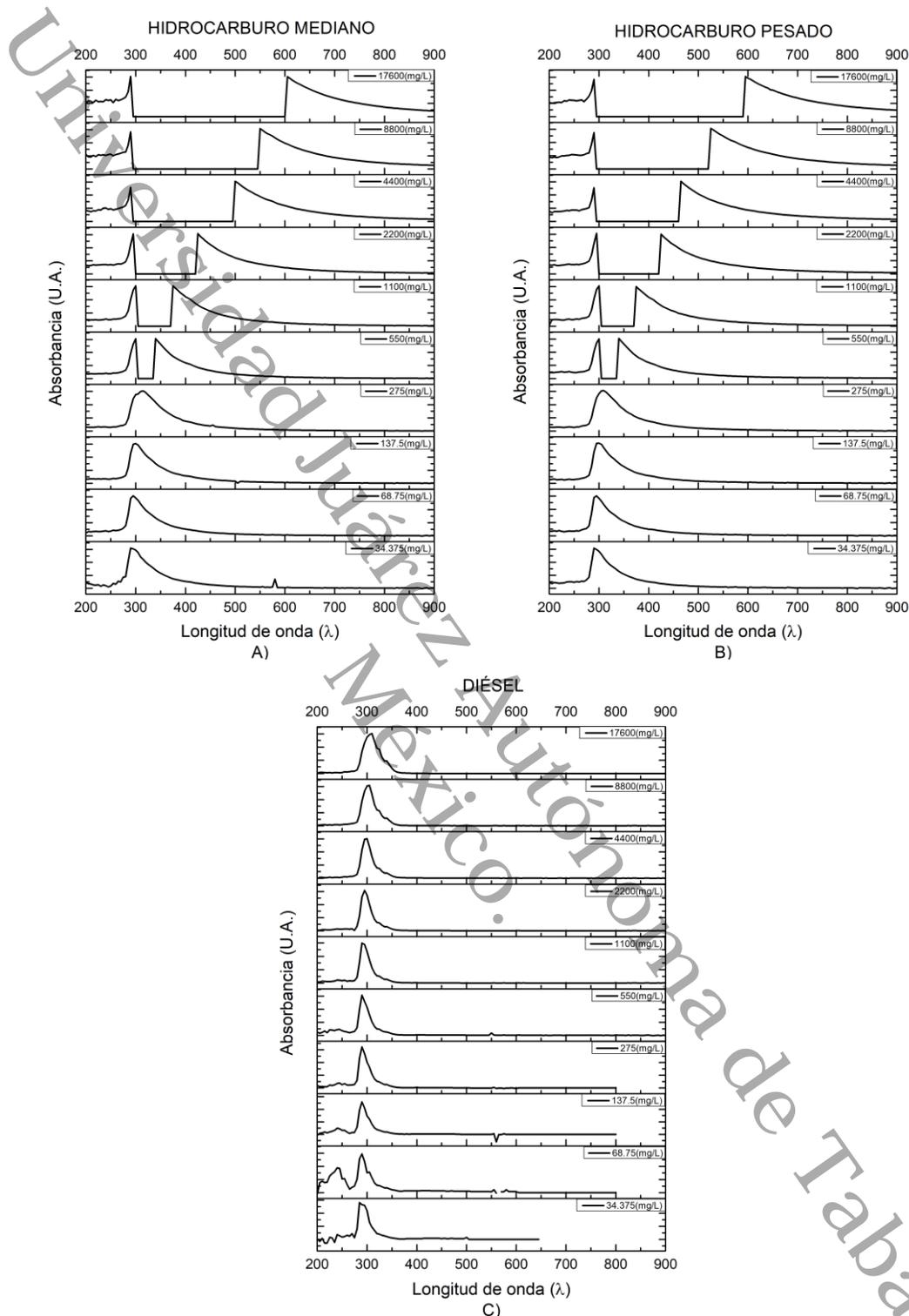
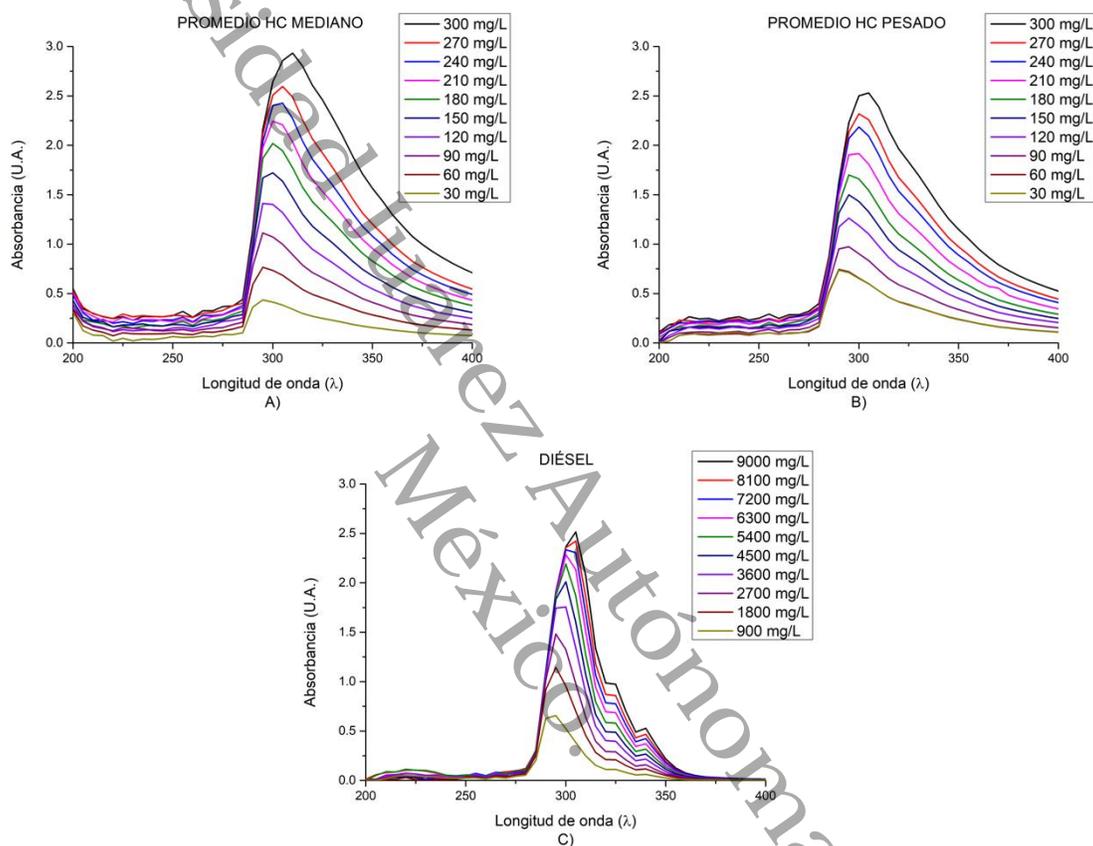


Figura 17 A, B y C. Espectro UV-Vis de la fracción mediana, pesada y diésel de 200 a 900 nm. Construcción propia.

Como puede observarse el espectro UV-Vis de las muestras (figura 17 A, B Y C), estas presentan una región de absorbancia máxima entre 280 y 340nm y

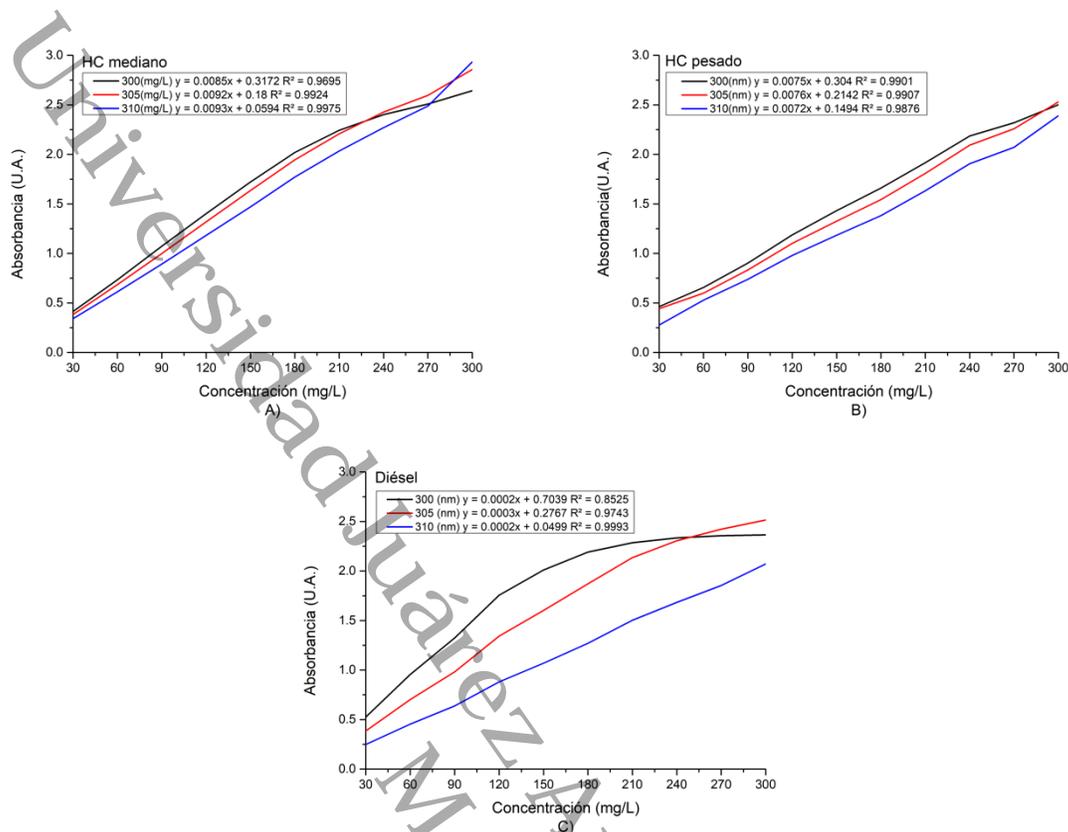
concentración máxima de 275 mg/L debido a las especificaciones del equipo, para asegurar lecturas confiables se decidió ajustar el rango de lecturas para todas las muestras de 200 a 400nm y se ajustó el rango de concentración para las fracciones de hidrocarburos pesado y mediano entre 300 a 30 mg/L y para el diésel se ajustó de 9000 a 900 mg/L. En estas condiciones, se realizaron las lecturas por triplicado, para un procesamiento estadístico. En la **figura 18 A, B y C**, se presentan los espectros promedio de tres determinaciones para cada analito.



**Figura 18 A, B y C. Promedio del triplicado para un posterior análisis estadístico.** Construcción propia.

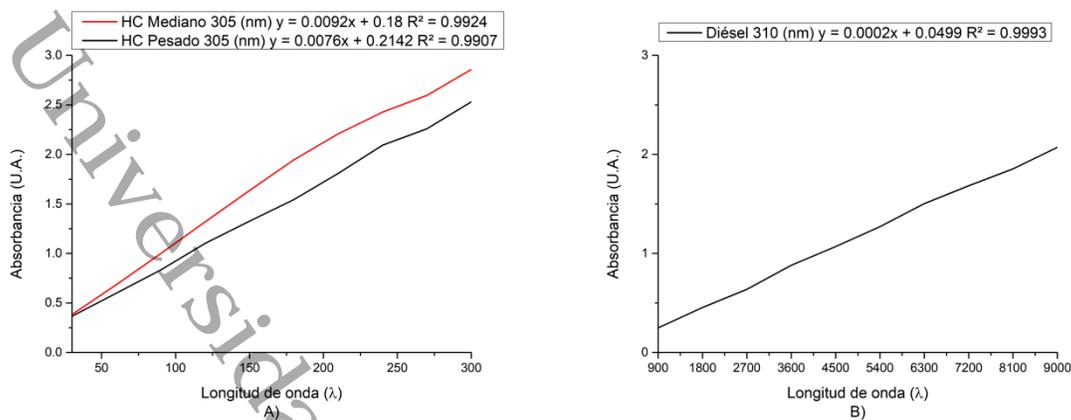
### 12.2.3 Selección de la longitud de onda óptima de trabajo

Para encontrar la longitud de onda óptima de trabajo se seleccionó el pico máximo y las lecturas correspondientes a longitudes de onda 5 nm antes y 5 nm después del mismo, seleccionando la longitud de onda que tenga mejor regresión lineal y absortividad. En la **figura 19 A, B y C**, se presentan las longitudes de onda máxima de absorbancia (305 nm) junto a una lectura antes y después para cada fracción de hidrocarburo:



**Figura 19 A, B y C. Longitudes de onda de 300 nm a 310 nm de las fracciones de HC mediano, pesado y diésel. Construcción propia.**

Con base en la información que proporcionaron las curvas (**figura 19 A, B y C**), se determinó la longitud de onda óptima para las fracciones de hidrocarburos. La longitud de onda óptima del HC mediano se encuentra en los 305 nm considerando esta como la longitud de onda optima a pesar de que a 310 nm tiene mejor regresión lineal a 305 nm tiene una mayor sensibilidad por ser esta longitud la que mayor absorbancia presenta será la que utilizaremos, la longitud de onda del hidrocarburo pesado de la misma manera en los 305 nm siendo esta la que mayor absorbancia presenta y mejor regresión lineal y para el diésel esta se encuentra a los 310 nm teniendo las mismas cualidades que la longitud de onda del hidrocarburo pesado.



**Figura 20 A y B. Longitud de onda óptima de trabajo para las fracciones de HC mediano, pesado y diésel. Construcción propia.**

Una vez seleccionada la longitud de onda óptima de trabajo, se obtuvieron las siguientes ecuaciones:

$$\text{HC Mediano: } Y = 0.0092x + 0.18$$

**Ecuación 20.**

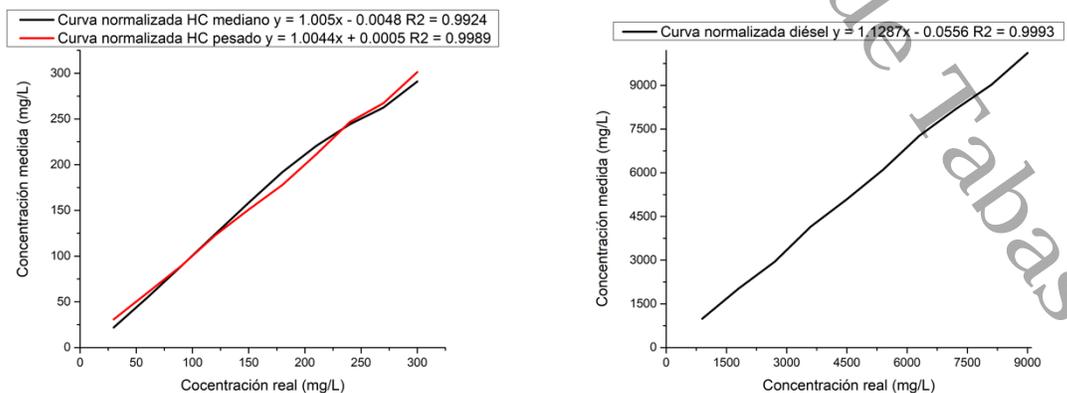
$$\text{HC Pesado: } Y = 0.0076x + 0.2142$$

**Ecuación 21.**

$$\text{Diésel: } Y = 0.0002x + 0.499$$

**Ecuación 22.**

Aunque con estas ecuaciones ya es posible calcular la concentración de la muestra problema, para aumentar el grado de precisión del método se normalizaron las curvas para eliminar los errores sistemáticos, por lo que se relacionó la concentración medida ( $C_m$ ) contra la concentración real ( $C_r$ ) (figura 21 A y B) y se obtienen las **ecuaciones 23, 24 y 25**:



**A)**

**B)**

**Figura 21. Relación entre concentración medida y concentración real.**  
 Construcción propia.

$$\text{Curva normalizada HC mediano Cobs} = 1.005(\text{Cr}) - 0.0048$$

**Ecuación 23.**

$$\text{Curva normalizada HC pesado Cobs} = 1.0044(\text{Cr}) + 0.0005$$

**Ecuación 24.**

$$\text{Curva normalizada diésel: Cobs} = 1.1287(\text{Cr}) - 0.0556$$

**Ecuación 25.**

Donde:

y = Concentración observada (Cobs)

x = Concentración real (Cr)

Las **ecuaciones 23, 24 y 25** serán utilizadas como el valor de X en las ecuaciones 20,21 y 22 dando como resultado las siguientes ecuaciones:

$$\text{HC mediano Abs}_{\text{real}} = 0.0092(\text{Cobs} = 1.005(\text{Cr}) - 0.0048) + 0.18$$

**Ecuación 26.**

$$\text{HC pesado Abs}_{\text{real}} = 0.0076(\text{Cobs} = 1.0044(\text{Cr}) + 0.0005) + 0.2142$$

**Ecuación 27.**

$$\text{Diésel Abs}_{\text{real}} = 0.0002(\text{Cobs} = 1.1287(\text{Cr}) - 0.0556) + 0.499$$

**Ecuación 28.**

Despejando de las **ecuaciones 26 a 28** se obtienen las siguientes:

$$\text{Curva normalizada HC mediano Cr} = \frac{\left(\frac{\text{Absm}-0.18}{0.0092}\right)+0.0048}{1.005}$$

**Ecuación 29.**

$$\text{Curva normalizada HC pesado Cr} = \frac{\left(\frac{\text{Absm}-0.2142}{0.0076}\right)-0.0005}{1.0044}$$

**Ecuación 30.**

$$\text{Curva normalizada diésel Cr} = \frac{\left(\frac{\text{Absm}-0.499}{0.0002}\right)-0.0556}{1.1287}$$

**Ecuación 31.**

A partir de las **ecuaciones 29, 30 y 31** se puede obtener la Concentración real (Cr) de las muestras problemas de manera más precisa al aplicar el factor de corrección en las **ecuaciones 20, 21 y 22**, este factor de corrección corresponde al error sistemático del método.

De igual manera, se calculó el límite de detección (LOD) y cuantificación (LOQ) utilizando los valores de la ordenada al origen y la desviación estándar de y ( $S_{y/x}$ ) (Miller, 2002)

$$(\text{LOD}) = b (\text{ordenada al origen}) + 3(S_{y/x})$$

**Ecuación 32.**

La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, International Union of Pure and Applied Chemistry) usa un valor de 3 veces la desviación estándar para establecer un 95% de confianza y para el límite de cuantificación se utiliza 10 veces la desviación estándar para asegurar que la señal es lo suficientemente fuerte, robusta y confiable, dando la siguiente ecuación (Gary D. Christian, 2009):

$$(\text{LOQ}) = b (\text{ordenada al origen}) + 10(S_{y/x})$$

**Ecuación 33.**

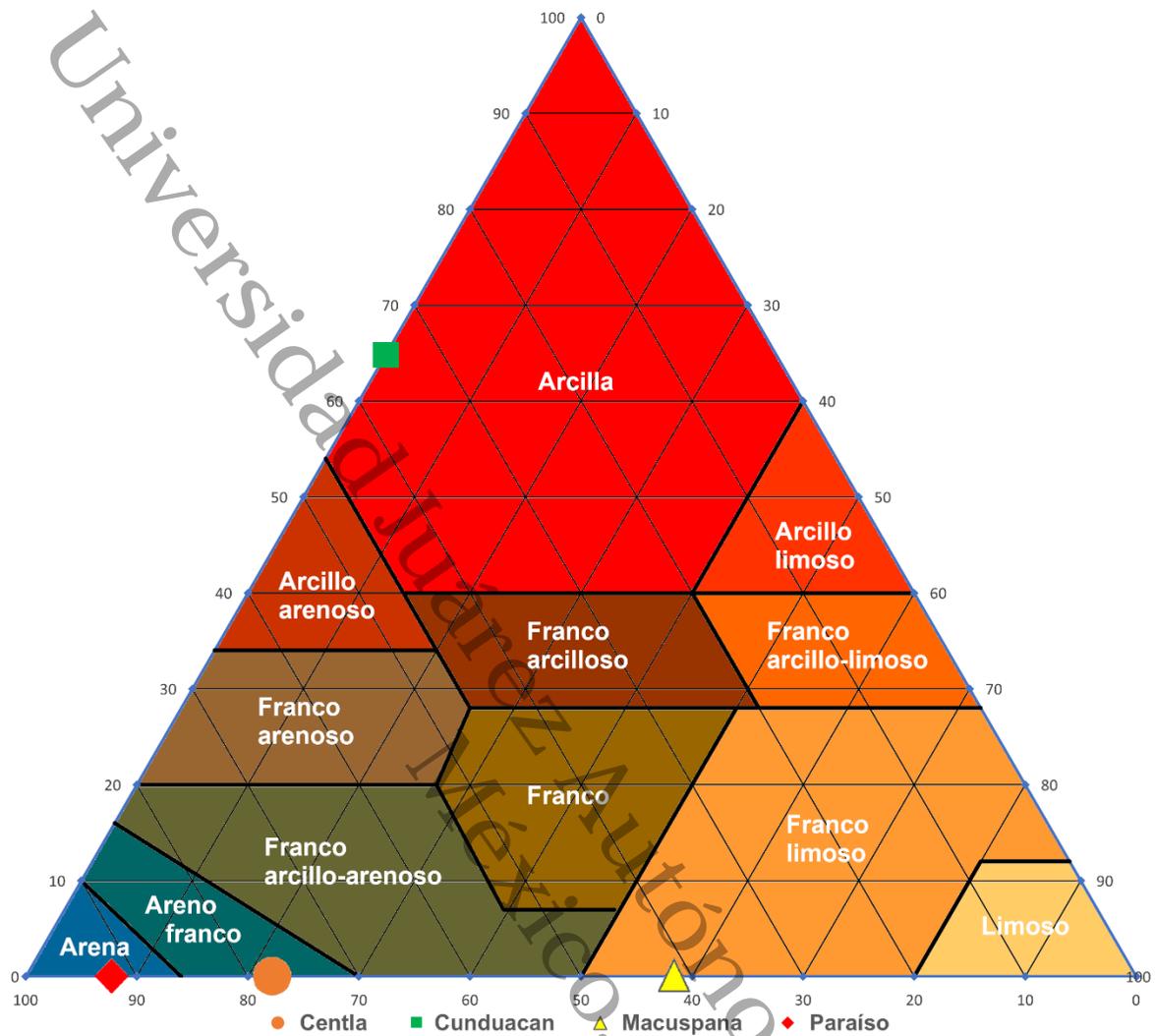
Aplicando las **ecuaciones 32 y 33** se obtienen los datos de LOD y LOQ:

	LOD (mg/L)	LOQ (mg/L)
HC mediano	0.4131	0.9571
HC pesado	0.4277	0.9260
Diésel	0.1033	0.2279

**Tabla 6. Límite de detección y límite de cuantificación para las fracciones de hidrocarburo y diésel.** Construcción propia.

### 9.3. Tratamiento PECT

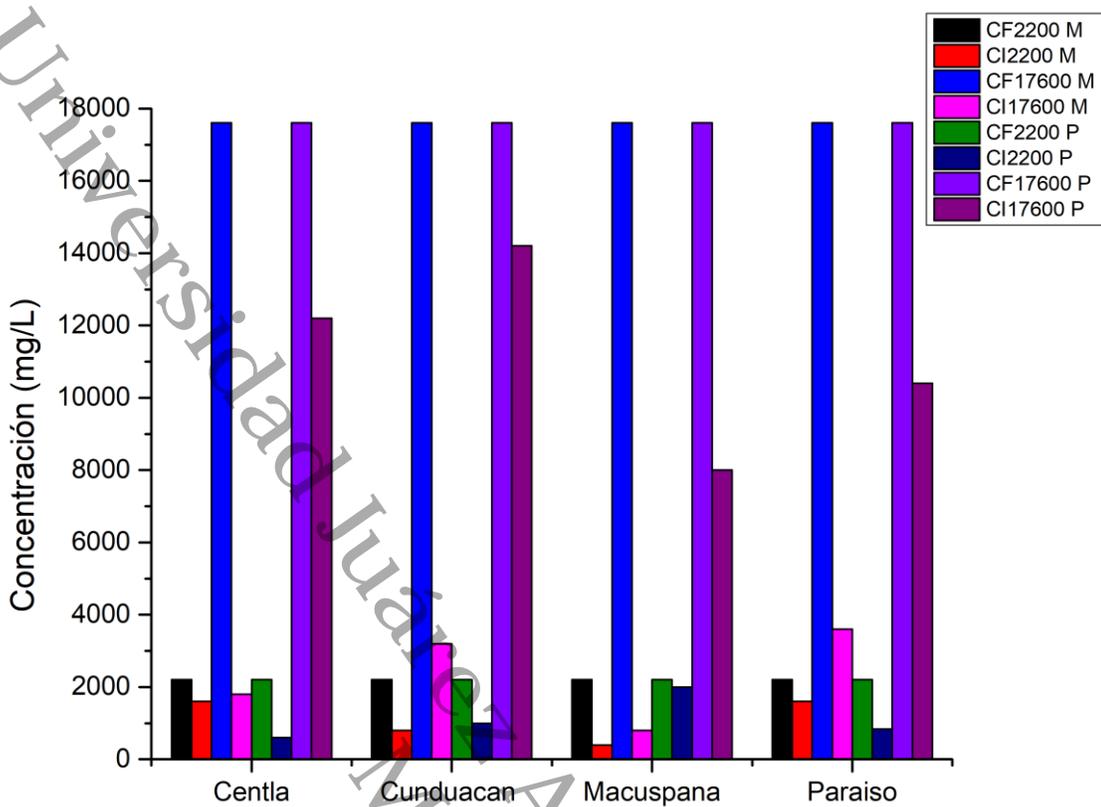
Para esta parte, se utilizaron las curvas de calibración normalizadas, con el fin de realizar la cuantificación de HTP en el extracto acuoso PECT, realizado en cuatro matrices de suelo de los municipios de Centla, Cunduacán, Macuspana y Paraíso, que previamente fueron caracterizados en su textura en Alegria-Hernández *et al.*, (2019) (**figura 23**). Fueron contaminados con las fracciones de hidrocarburo mediano y pesado, a 2200 mg/L y 17600 mg/L que corresponden respectivamente a la mitad y a cuatro veces el valor establecido en la NOM-138-SEMARNAT/SSA1-2012, (SEMARNAT, 2012), para estos contaminantes que es de 4400 mg/L (Alegria-Hernández *et al.*, 2019).



**Figura 22. Textura de los suelos analizados.** Construcción propia.

### 9.3.1. Cuantificación del extracto PECT. (límite establecido en norma).

El suelo utilizado para el extracto fue contaminado a 2200 y 17600 mg/L contaminado fresco e intemperizado (Alegría-Hernández *et al.*, 2019) y mediante la técnica de extracción de grasas (soxhlet) se determinó la concentración inicial de HTP en cada suelo fresco e intemperizado (**figura 23**):



**Figura 23. Comparativa de contenido de HC inicial y final.** Construcción propia.

CF: Contaminado fresco, CI: Contaminado intemperizado, M: Hidrocarburo mediano y P: Hidrocarburo pesado.

En los suelos contaminados frescos la concentración inicial de HTP no disminuyó, por lo tanto, la concentración inicial sigue, en cambio los suelos contaminados intemperizados disminuyen drásticamente la concentración del hidrocarburo.

Aplicando las **ecuaciones 29 y 30**, se obtuvieron las siguientes concentraciones del extracto para los suelos frescos e intemperizados:

Suelo contaminado*		
Fresco	HTP	PECT
Cen med 2.2	2200	<LOD
Pa med 2.2	2200	<LOD
Cu med 2.2	2200	<LOD
Ma med 2.2	2200	<LOD
Cen med 17.6	17600	1.627
Pa med 17.6	17600	<LOD
Cu med 17.6	17600	<LOD
Ma med 17.6	17600	<LOD

Suelo contaminado*		
Intemperizado	HTP	PECT
Cen med 2.2	1600	<LOD
Pa med 2.2	1600	<LOD
Cu med 2.2	800	<LOD
Ma med 2.2	400	<LOD
Cen med 17.6	1800	<LOD
Pa med 17.6	3200	<LOD
Cu med 17.6	800	<LOD
Ma med 17.6	3600	<LOD

Cen pes 2.2	2200	<LOD	Cen pes 2.2	600	<LOD
Pa pes 2.2	2200	<LOD	Pa pes 2.2	1000	<LOD
Cu pes 2.2	2200	<LOD	Cu pes 2.2	2000	<LOD
Ma pes 2.2	2200	<LOD	Ma pes 2.2	840	<LOD
Cen pes 17.6	17600	<LOD	Cen pes 17.6	12200	<LOD
Pa pes 17.6	17600	<LOD	Pa pes 17.6	14200	<LOD
Cu pes 17.6	17600	<LOD	Cu pes 17.6	8000	<LOD
Ma pes 17.6	17600	9.910	Ma pes 17.6	10400	<LOD
M LOD: 0.4131 mg/L, P LOD: 0.4277 mg/L			M LOD: 0.4131 mg/L, P LOD: 0.4277 mg/L		

**Tabla 7. Resultados del extracto PECT a la longitud de onda de 305 nm.**

Construcción propia.

\*17.6= 17600 mg/L, 2.2= 2200 mg/L, Cen= Centla, Pa= Paraíso, Cu= Conduacán, Ma= Macuspana, M LOD= límite de detección de HC mediano, P LOD= límite de detección de HC pesado.

De las 32 muestras solo dos lixiviaron, los cuales están por debajo de la NOM-001-SEMARNAT-2021(SEMARNAT), 2022), que establece el límite de 15 mg/L de descarga en cuerpo de agua, según (Gutiérrez C, 2002), se esperaría que en suelos de tipo arenosos/limosos tuvieran la capacidad de lixiviar por su poca capacidad de sorción, Martínez & López S., (2001) establece que para empezar a ver cambios en las propiedades físico-químicas tales como textura, porosidad y  $\rho$  se ve en cantidades a partir de 150,000 mg/Kg, estando debajo de esas concentraciones no se notan cambio y el hidrocarburo está fuertemente retenido y esparcido a pesar de tener un suelo contaminado fresco del que si se esperaba el lixiviado.

## 10. Conclusiones

El método propuesto para cuantificar el extracto PECT es confiable para los compuestos cromóforos que absorben a los 305 nm, para las fracciones de hidrocarburo mediano y pesado.

A falta de un suelo contaminado con diésel, no se puede asegurar que este sea efectivo en muestras de extracto PECT.

Se cumple la ley de Lambert-Beer al existir una relación proporcional entre la absorbancia y el analito en las muestras contaminadas con hidrocarburos medianos y pesados

Para considerar que es un método confiable, robusto y preciso, se tomaron en cuenta los criterios tales como la  $R^2$ , límite de detección y de cuantificación, más que suficientes para una muestra compleja.

La técnica propuesta por UV-Vis, puede aplicarse en muestras acuosas de 1 mg/L para hidrocarburos mediano y pesado, cuantificando concentraciones por debajo de los 15 mg/L como establece la NOM-138-SEMARNAT/SSA1-2012 (SEMARNAT, 2012) y por encima hasta 300 mg/L, así cumpliendo con los límites permisibles de esta.

Debido a la complejidad muestra compleja se tomó 0.99 de regresión lineal como aceptable en las curvas de calibración de los analitos.

## 11. Perspectivas

Considerar emplear y demostrar la eficacia de la curva para diésel con una muestra de suelo contaminado con este.

Se podría emplear otra técnica analítica como cromatografía de gases o infrarrojo, para complementar y conocer los principales grupos o especies presentes en el analito.

Para darle seguimiento a este trabajo de investigación, se podrían utilizar fracciones de los hidrocarburos evaluados de diferentes procedencias y comparar los resultados.

## 12. Referencias citadas

- Alegría-Hernández, B. A., Torres-Sánchez, S. A., Alor-Chávez, M., & others. (2019). EVALUACIÓN DE LOS CAMBIOS EN LAS CONCENTRACIONES DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN DOS TIPOS DE SUELOS. *Journal of Energy, Engineering Optimization and Sustainability*, 3(2), 19–32.
- Arguijo-Portillo, N. V., Guerrero-Peña, A., Domínguez-Rodríguez, V. I., Carrillo-Ávila, E., & Zavala-Cruz, J. (2019). MODELOS DE CALIBRACIÓN PARA LA CUANTIFICACIÓN ESPECTROFOTOMÉTRICA DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN SUELO. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 35(2), 469–479. <https://doi.org/10.20937/RICA.2019.35.02.17>
- ASTM International. (2003). *Standard practice for extraction of solid waste samples for chemical analysis using Soxhlet extraction: Vol. 11.04* (ASTM D5369-93 (2003)).
- Chino, P. (2018). *Capítulo 5: Extracción de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos desde matrices sólidas empleando surfactantes*. Lady Catalina Cabana Saavedra.
- Cloarec, O., Gonzalez, C., Touraud, E., & Thomas, O. (2002). Improvement of UV spectrophotometry methodology for the determination of total polycyclic aromatic compounds in contaminated soils. *Analytica Chimica Acta*, 453(2), 245–252. [https://doi.org/10.1016/S0003-2670\(01\)01432-5](https://doi.org/10.1016/S0003-2670(01)01432-5)
- Cromlab-instruments.es. (n.d.). *Los Eluyentes en HPLC*. Retrieved June 5, 2024, from <https://cromlab-instruments.es/los-eluyentes-en-hplc/>
- Gary D. Christian. (2009). *Química Analítica* (Sexta edición). Mc Graw Hill.
- Gutiérrez C, M. D., & Z. C., J. (2002). Rasgos hidromórficos de suelos tropicales contaminados con hidrocarburos. *Terra Latinoamericana*, 20(2), 101–111.
- Herrera Herbert, J. (2020). *Ingeniería de la perforación de pozos de petróleo y gas. Vol. I: Origen y características de los hidrocarburos*. Universidad Politécnica de Madrid. Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas y Energía. <https://doi.org/10.20868/UPM.book.62714>
- Hidalgo, A. G. A. (2006). *Evaluación de un método por espectroscopía UV-VIS para la detección de contaminantes orgánicos en agua*. Guatemala.
- Jean-Pierre Wauquier. (2004). *El Refino Del Petróleo: Petróleo Crudo, Productos Petrolíferos, Esquemas de Fabricación*. Edition Technip.
- Kariyawasam, T., Doran, G. S., Howitt, J. A., & Prenzler, P. D. (2022). Polycyclic aromatic hydrocarbon contamination in soils and sediments: Sustainable approaches for extraction and remediation. *Chemosphere*, 291, 132981.
- Martínez, V. E., & López S., M. Y. (2001). Efecto de hidrocarburos en las propiedades físicas y químicas de suelo arcilloso. *Terra Latinoamericana*, 19(1), 9–17.

- Martínez-Chávez, C. G., Morales-Bautista, C. M., & Alor-Chávez, M. de J. (2017). Extracción de hidrocarburo pesado en suelo arenoso. *Avances En Ciencias e Ingeniería*, 8(1), 9–16.
- Miller, N. J. y M. J. C. (2002). *Estadística y Quimiometría para Química Analítica* (4a edición). PEARSON EDUCACIÓN. S.A.
- Pons-Jiménez, Guerrero-Peña, A., Zavala-Cruz, J., & Alarcón, A. (2011). Universidad y ciencia. In *Universidad y ciencia* (Vol. 27, Issue 1). Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Dirección de Investigación y Posgrado. [http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0186-29792011000100001&lng=es&nrm=iso&tlng=](http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0186-29792011000100001&lng=es&nrm=iso&tlng=)
- Quesada Mora, S. (2007). *Manual de experimentos de laboratorio para bioquímica*. EUNED.
- Rueda-Beaurregard, J. M., Alegría-Hernández, B. A., Vázquez-Vázquez, L. L., Vargas-González, R. E., López-Martínez, S., Fuentes-Domínguez, I., Lobato-García, C. E., & Morales-Bautista, C. M. (2023). Determinación de la gravedad API por los métodos directo e indirecto (picnometría). *Journal of Basic Sciences*, 9(25), 19–26.
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales & Secretaría de Salud. (2012). *NOM-138-SEMARNAT/SSA1-2012, Límites máximos permisibles de hidrocarburos en suelos y las especificaciones para su caracterización y remoción*.
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT). (2022). *NOM-001-SEMARNAT-2021, Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en cuerpos receptores propiedad de la nación*.
- Skoog, D. A. (2014). *Douglas A. Skoog, Donald M. West, F. James Holler, and Stanley R. Crouch: Fundamentals of analytical chemistry, international ed*. Springer.
- Villa, R. A. S., Sánchez, X. C., & Pérez, E. H. (2016). Estandarización de un método para el análisis de hidrocarburos aromáticos policíclicos en muestras de agua empleando espectroscopia ultravioleta y HPLC. *Journal de Ciencia e Ingeniería*, 8(1), 39–46.
- Wall Loya, C. M., & others. (2024). *EFFECTO DE LAS INTERACCIONES NANOPARTÍCULAS DE Co PARA EL MEJORAMIENTO DE LAS PROPIEDADES REOLÓGICAS DE UN CRUDO PESADO*.
- Yzquierdo-Ruiz, M. M., Torres-Sánchez, S. A., De la Garza-Rodríguez, I. M., Ojeda-Morales, M. E., Hernández-Nuñez, E., Lobato-García, C. E., Hernández-Rivera, M. A., Zurita-Macias-Valadez, M., & Morales-Bautista, C. M. (2022). Pre-evaluation of contaminated soil for oil field reactivation in Moloacan, Veracruz, Mexico. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 21(2), 1–20. <https://doi.org/10.24275/rmiq/IA2753>

## 13. Anexos

### 13.1. Medición de grados API

Para la medición de grados API se utilizaron las **ecuaciones 8 y 9**, se presentan los datos para realizar estos cálculos:

HC mediano	Peso analito (g)	Volumen (ml)	T Corregida (°C)	°API	°API normalizados
1	8.553	10	81.5	33.939	1.155
2	8.642	10	49.5	32.235	1.097
3	8.745	10	34.5	30.307	1.031
4	8.764	10	-1.5	29.956	1.019
5	8.859	10	-18.5	28.225	0.960

HC pesado	Peso analito (g)	Volumen (ml)	T Corregida (°C)	°API	°API normalizados
1	9.14	10	22.7	23.314	1.177
2	8.958	10	32.8	26.459	1.336
3	8.8	10	53.2	29.295	1.479
4	8.584	10	76	33.342	1.684
5	8.521	10	81.8	34.560	1.745

Diésel	Peso analito (g)	Volumen (ml)	T Corregida (°C)	°API	°API normalizados
1	40.931	50	31.5	41.352	1.141969917
2	41.791	50	13.5	37.795	1.04373876
3	42.337	50	-2.5	35.612	0.983444534
4	40.07	50	61.5	45.066	1.244539214
5	41.174	50	23.5	40.332	1.113797975

**Tabla 8. Datos grados API. Construcción propia.**

### 13.2. Cálculo de la concentración 17600 mg/L

Para el cálculo de la solución patrón de los barridos de la **figura 17 A, B, y C**. Se utilizó la siguiente ecuación:

$$\text{Concentración (mg/L)} = \frac{\text{Masa del soluto (mg)}}{\text{Volumen de la solución (L)}}$$

**Ecuación 34.**

Obteniendo para cada fracción y diésel los siguientes valores:

17600 mg/L	HC mediano	HC pesado	Diésel
Muestra	Peso (g)		
1	0.88	0.883	0.88
2	0.881	0.882	0.879
3	0.878	0.879	0.881

**Tabla 9. Valores pesados para la concentración de 300 y 9000 mg/L. Creación propia. Construcción propia.**

### 13.3. Cálculo de la concentración 300 mg/L

Para el cálculo de la solución patrón de los barridos de la figura 18 A, B y C. Se utilizó la ecuación 34 y se obtuvieron los siguientes valores:

300 mg/L	HC mediano	HC pesado	Diésel
Muestra	Peso (g)		
1	0.015	0.015	0.45
2	0.016	0.015	0.452
3	0.015	0.014	0.456

Tabla 10. Valores pesados para la concentración de 300 y 9000 mg/L. Construcción propia.

### 13.4. Cálculo de las diluciones.

En el caso de las diluciones de las soluciones patrón se empleó la ecuación:

$$C1V1 = C2V2$$

Ecuación 35.

La cual se despejó para obtener la concentración final (C2):

$$C2 = \frac{C1V1}{V2}$$

Ecuación 36.

Obteniendo así 10 diluciones:

Solución patrón	Diclorometano
10	0
9	1
8	2
7	3
6	4
5	5
4	6
3	7
2	8
1	9

Tabla 11. Proporción de las diluciones. Construcción propia.

### 13.5. Intervalo de trabajo y linealidad

#### 13.5.1. Intervalo de trabajo

Es el rango en el que el método ofrece resultados con una incertidumbre tolerable. El límite inferior del rango de trabajo está establecido por el límite de cuantificación.

El límite superior está determinado por las concentraciones en las que se detectan anomalías significativas en la sensibilidad analítica.

La evaluación del rango de trabajo se realiza entre el límite de cuantificación y el límite superior del rango de trabajo del instrumento, donde la respuesta del instrumento sigue una relación predefinida, como lineal o curvilínea.

### 13.5.2. Linealidad

Un estudio de linealidad verifica que la respuesta sea proporcional a la concentración del analito dentro del rango de concentración de las soluciones de muestra. Este estudio se debe realizar utilizando soluciones estándar en cinco niveles de concentración, que abarquen del 50 al 150% de la concentración de referencia del analito. Estos cinco niveles permiten detectar cualquier curvatura en la curva de calibración, y cada estándar debe medirse al menos tres veces (Gary D. Christian, 2009).

Los datos de linealidad suelen evaluarse con base en el coeficiente de determinación ( $R^2$ ) y la intersección con el eje y de la línea de regresión lineal. Un valor de  $r^2$  de 0.998 indica un ajuste adecuado de los datos a la línea de regresión, y la intersección con el eje y debe ser un pequeño porcentaje de la concentración de referencia del analito, por ejemplo, 2%. Aunque estas evaluaciones estadísticas son prácticas para juzgar la linealidad, no la garantizan, por lo que siempre se debe realizar una inspección visual de la curva de calibración. La linealidad puede desviarse en los valores altos y bajos, por lo que se pueden preferir gráficos de mínimos cuadrados ponderados, que dan mayor peso a los puntos con menor desviación (Gary D. Christian, 2009).

Al observar el gráfico, se puede evaluar cualitativamente el rango lineal. Una vez establecido el comportamiento lineal del método, se debe elaborar la curva de trabajo o curva de calibración. Esto implica graficar los datos de concentración de los estándares de calibración estimados (X) versus la lectura observada (Y) y ajustarlos con la ecuación:

$$y = mx + b$$

**Ecuación 37**

Donde:

y es la respuesta medida (por ejemplo, absorbancia, intensidad de fluorescencia, señal de un detector, etc.).

x es la concentración del analito.

m es la pendiente de la curva (representa la sensibilidad del método).

b es la ordenada al origen (intercepto), que puede representar la respuesta del instrumento en ausencia del analito.

### 13.6. LOD y LOQ

El límite de detección (LOD) se define como la concentración mínima del analito en una muestra que puede ser detectada, aunque no necesariamente medida con precisión, bajo las condiciones especificadas de la prueba. Los valores superiores al límite de detección indican la presencia del analito, mientras que los valores inferiores a este límite sugieren que el analito no está presente en cantidades detectables (Miller, 2002).

El límite de detección se define cómo:

$$\text{LOD} = b + 3S_{y/x}$$

**Ecuación 38.**

Donde:

b: pendiente de la curva de calibración.

$S_{y/x}$ : desviación estándar de la curva de calibración.

La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC), establece el valor de 3 en la ecuación 38, como un 95% de confianza (Miller, 2002).

Y para el límite de cuantificación (LOQ):

$$\text{LOQ} = b + 10S_{y/x}$$

**Ecuación 39.**

Donde:

b: pendiente de la curva de calibración.

$S_{y/x}$ : desviación estándar de la curva de calibración.

Esta señal es lo suficiente intensa para medirse con más exactitud. Una muestra que se encuentre entre los límites de cuantificación y detección se considera en la región de detección (Miller, 2002).

### 13.7. Textura

Datos para la elaboración del diagrama de textura:

Centla		
%R	%L	%A
0	21.45	78.54
Cunduacán		
%R	%L	%A
64.82	0	35.17
Macuspana		
%R	%L	%A
0	58.56	41.43
Paraíso		
%R	%L	%A
0	7.4	92.6

**Tabla 12. Porcentajes de R, L y A de los suelos.** (Alegria-Hernández *et al.*, 2019)

%R: porcentaje de arcillas

%L: Porcentaje de limos

%A: Porcentaje de arenas

### 13.8. HTP

Datos de las concentraciones de hidrocarburos totales del petróleo:

	CF2200 M	CI2200 M	CF17600 M	CI17600 M
	Concentración (mg/L)			
Centla	2200	1600	17600	1800
Cunduacan	2200	800	17600	3200
Macuspana	2200	400	17600	800
Paraiso	2200	1600	17600	3600
	Concentración (mg/L)			
	CF2200 P	CI2200 P	CF17600 P	CI17600 P
Centla	2200	600	17600	12200
Cunduacan	2200	1000	17600	14200
Macuspana	2200	2000	17600	8000
Paraiso	2200	840	17600	10400

**Tabla 13. Datos de la concentración de HTP.** (Alegria-Hernández *et al.*, 2019)

## 14. Glosario

**Absortividad:** La absortividad se refiere a la medida de la cantidad de luz absorbida por una disolución, definida como la absorbancia por unidad de concentración por unidad de longitud del camino óptico.

**Alícuota:** Una parte de una masa o de un volumen que se toma para realizar una prueba se denomina muestra.

**Curva de Calibración:** La curva de calibración es una técnica ampliamente empleada en química analítica para determinar la concentración de una sustancia (analito) en una muestra desconocida, especialmente en disoluciones. Este método se fundamenta en la relación proporcional entre la concentración del analito y una señal analítica específica (propiedad). Conocer esta relación permite determinar la concentración en una muestra dada mediante la medición de esa señal. La relación entre concentración y señal se representa típicamente en una gráfica conocida como curva de calibración o curva de calibrado.

**Diclorometano:** El cloruro de metileno, también conocido como diclorometano, es un líquido incoloro con un ligero olor dulce que no se evapora ni se enciende fácilmente.

**Espectrofotometría:** La espectrofotometría es una técnica analítica empleada para determinar cuánta luz absorbe una sustancia química. Esto se logra al medir la intensidad de la luz cuando un haz luminoso atraviesa una muestra de solución, basándose en la ley de Lambert-Beer.

**Hexano:** El hexano, o n-hexano, es un hidrocarburo alifático saturado con seis átomos de carbono en su estructura molecular. Su fórmula química es  $C_6H_{14}$ .

**Hidrocarburo:** Un compuesto químico formado por carbono e hidrógeno se denomina hidrocarburo.

**Ley de Lambert-Beer:** La ley de Lambert-Beer establece que la absorbancia aumenta con la concentración de una sustancia en una solución.

**Longitud de onda:** La distancia entre dos crestas consecutivas de una onda, incluyendo una onda electromagnética, se denomina longitud de onda. Esta longitud de onda es inversamente proporcional a la frecuencia y, por lo tanto, a la energía de la onda.

**Matriz:** La matriz de la muestra se refiere al conjunto de todas las especies químicas que están presentes junto con el analito en la muestra.

**Patrón:** En una disolución patrón, se utiliza un reactivo de concentración exactamente conocida. Estas disoluciones son fundamentales en todos los métodos volumétricos. Para establecer su concentración, existen dos opciones: prepararlas mediante un método directo o por un método indirecto conocido como normalización.

**Robustez:** La "robustez" de un procedimiento analítico se define como la capacidad del método para mantenerse sin cambios ante pequeñas variaciones deliberadas de los parámetros del método. Esta cualidad proporciona una indicación de la fiabilidad del método durante su aplicación habitual.

**Solvente:** Un disolvente o solvente es una sustancia química en la cual se disuelve un soluto, formando una disolución. Generalmente, el solvente es el componente de la disolución que está presente en mayor cantidad.

**UV-Vis:** La espectroscopía UV-Vis se fundamenta en el proceso mediante el cual una molécula absorbe radiación ultravioleta-visible (radiación con longitudes de onda entre aproximadamente 160 y 780 nm).

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.  
México.

Alojamiento de la Tesis en el Repositorio Institucional	
Título de Tesis:	<b>DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN EXTRACTO (PECT) DE SUELOS CONTAMINADOS</b>
Autor(a) o autores(ras) de la Tesis:	José Angel Navarro Rangel
ORCID:	0009-0002-3733-3557
Resumen de la Tesis:	<p>Esta tesis, realizada en el laboratorio de suelos e hidrocarburos de la División Académica de Ciencias Básicas (DACB), presenta la evaluación de un método analítico para la cuantificación de Hidrocarburos Totales del Petróleo (HTP) mediante la técnica espectrofotométrica de ultravioleta-visible (UV-Vis). Este método se utiliza para determinar lixiviados de los constituyentes tóxicos del residuo en extractos acuosos, conforme a la NOM-053-SEMARNAT-1993 para el Procedimiento de Extracción de Constituyentes Tóxicos (PECT), con la finalidad de identificar si dicho residuo es peligroso debido a su toxicidad ambiental.</p> <p>Este método permite cuantificar, a una longitud de onda de 305 nm, el contenido de compuestos cromóforos de los HTP en extractos acuosos provenientes del extracto PECT, mediante una extracción líquido-líquido de los compuestos orgánicos de la fase acuosa con un solvente orgánico. Se utilizó diclorometano (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) como solvente, debido a su afinidad por los HTP conferida por su momento dipolar.</p> <p>Se comprobó la correlación entre la absorbancia y la concentración de los grupos cromóforos absorbentes mediante la elaboración de curvas de calibración con las fracciones de HTP caracterizadas mediante grados API (°API). Así se determinaron las fracciones mediana y pesada para la elaboración de las curvas, comprobando la Ley de Lambert-Beer.</p>
Palabras claves de la Tesis:	Hidrocarburos totales del petróleo, grados API, espectrofotometría, UV-Visible, Extracto PECT, constituyentes tóxicos, cromóforos
Referencias citadas:	<p>gría-Hernández, B. A., Torres-Sánchez, S. A., Alor-Chávez, M., &amp; others. (2019). EVALUACIÓN DE LOS CAMBIOS EN LAS CONCENTRACIONES DE HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN DOS TIPOS DE SUELOS. <i>Journal of Energy, Engineering Optimization and Sustainability</i>, 3(2), 19–32.</p> <p>ujijo-Portillo, N. V., Guerrero-Peña, A., Domínguez-Rodríguez, V. I., Carrillo-Ávila, E., &amp; Zavala-Cruz, J. (2019). MODELOS DE CALIBRACIÓN PARA LA CUANTIFICACIÓN ESPECTROFOTOMÉTRICA DE</p>

HIDROCARBUROS TOTALES DEL PETRÓLEO EN SUELO. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 35(2), 469–479. <https://doi.org/10.20937/RICA.2019.35.02.17>

M International. (2003). *Standard practice for extraction of solid waste samples for chemical analysis using Soxhlet extraction: Vol. 11.04* (ASTM D5369-93 (2003)).

no, P. (2018). *Capítulo 5: Extracción de Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos desde matrices sólidas empleando surfactantes*. Lady Catalina Cabana Saavedra.

arec, O., Gonzalez, C., Touraud, E., & Thomas, O. (2002). Improvement of UV spectrophotometry methodology for the determination of total polycyclic aromatic compounds in contaminated soils. *Analytica Chimica Acta*, 453(2), 245–252. [https://doi.org/10.1016/S0003-2670\(01\)01432-5](https://doi.org/10.1016/S0003-2670(01)01432-5)

mlab-instruments.es. (n.d.). *Los Eluyentes en HPLC*. Retrieved June 5, 2024, from <https://cromlab-instruments.es/los-eluyentes-en-hplc/>

y D. Christian. (2009). *Química Analítica* (Sexta edición). Mc Graw Hill.

érrez C, M. D., & Z. C., J. (2002). Rasgos hidromórficos de suelos tropicales contaminados con hidrocarburos. *Terra Latinoamericana*, 20(2), 101–111.

rrera Herbert, J. (2020). *Ingeniería de la perforación de pozos de petróleo y gas. Vol. I: Origen y características de los hidrocarburos*. Universidad Politécnica de Madrid. Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas y Energía. <https://doi.org/10.20868/UPM.book.62714>

algo, A. G. A. (2006). *Evaluación de un método por espectroscopía UV-VIS para la detección de contaminantes orgánicos en agua*. Guatemala.

n-Pierre Wauquier. (2004). *El Refino Del Petróleo: Petróleo Crudo, Productos Petrolíferos, Esquemas de Fabricación*. Edition Technip.

yawasam, T., Doran, G. S., Howitt, J. A., & Prenzler, P. D. (2022). Polycyclic aromatic hydrocarbon contamination in soils and sediments: Sustainable approaches for extraction and remediation. *Chemosphere*, 291, 132981.

tínez, V. E., & López S., M. Y. (2001). Efecto de hidrocarburos en las propiedades físicas y químicas de suelo arcilloso. *Terra Latinoamericana*, 19(1), 9–17.

tínez-Chávez, C. G., Morales-Bautista, C. M., & Alor-Chávez, M. de J. (2017). Extracción de hidrocarburo pesado en suelo arenoso. *Avances En Ciencias e Ingeniería*, 8(1), 9–16.

er, N. J. y M. J. C. (2002). *Estadística y Quimiometría para Química Analítica* (4a edición). PEARSON EDUCACIÓN. S.A.

s-Jiménez, Guerrero-Peña, A., Zavala-Cruz, J., & Alarcón, A. (2011). Universidad y ciencia. In *Universidad y ciencia* (Vol. 27, Issue 1).

	<p>Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Dirección de Investigación y Posgrado.  <a href="http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&amp;pid=S0186-29792011000100001&amp;lng=es&amp;nrm=iso&amp;tlng=">http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&amp;pid=S0186-29792011000100001&amp;lng=es&amp;nrm=iso&amp;tlng=</a></p> <p>sada Mora, S. (2007). <i>Manual de experimentos de laboratorio para bioquímica</i>. EUNED.</p> <p>da-Beaurregard, J. M., Alegria-Hernández, B. A., Vázquez-Vázquez, L. L., Vargas-González, R. E., López-Martínez, S., Fuentes-Domínguez, I., Lobato-García, C. E., &amp; Morales-Bautista, C. M. (2023). Determinación de la gravedad API por los métodos directo e indirecto (picnometría). <i>Journal of Basic Sciences</i>, 9(25), 19–26.</p> <p>retaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales &amp; Secretaría de Salud. (2012). <i>NOM-138-SEMARNAT/SSA1-2012, Límites máximos permisibles de hidrocarburos en suelos y las especificaciones para su caracterización y remoción</i>.</p> <p>retaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT). (2022). <i>NOM-001-SEMARNAT-2021, Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en cuerpos receptores propiedad de la nación</i>.</p> <p>og, D. A. (2014). <i>Douglas A. Skoog, Donald M. West, F. James Holler, and Stanley R. Crouch: Fundamentals of analytical chemistry, international ed</i>. Springer.</p> <p>, R. A. S., Sánchez, X. C., &amp; Pérez, E. H. (2016). Estandarización de un método para el análisis de hidrocarburos aromáticos policíclicos en muestras de agua empleando espectroscopia ultravioleta y HPLC. <i>Journal de Ciencia e Ingeniería</i>, 8(1), 39–46.</p> <p>l Loya, C. M., &amp; others. (2024). <i>EFEECTO DE LAS INTERACCIONES NANOPARTÍCULAS DE Co PARA EL MEJORAMIENTO DE LAS PROPIEDADES REOLÓGICAS DE UN CRUDO PESADO</i>.</p> <p>Yzquierdo-Ruíz, M. M., Torres-Sánchez, S. A., De la Garza-Rodríguez, I. M., Ojeda-Morales, M. E., Hernández-Nuñez, E., Lobato-García, C. E., Hernández-Rivera, M. A., Zurita-Macias-Valadez, M., &amp; Morales-Bautista, C. M. (2022). Pre-evaluation of contaminated soil for oil field reactivation in Moloacan, Veracruz, Mexico. <i>Revista Mexicana de Ingeniería Química</i>, 21(2), 1–20. <a href="https://doi.org/10.24275/rmiq/IA2753">https://doi.org/10.24275/rmiq/IA2753</a></p>
--	---