

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultado de Ciencias y Humanidades



Evaluación del Método Analítico Azul de Molibdeno para la
Cuantificación de Arsénico en el Agua de la Capital de Guatemala

Trabajo de graduación en modalidad de tesis presentado por
Diana Gabriela Rosemberg Gonzalez
para optar al grado académico de Licenciada en
Química

Guatemala,
2023

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultado de Ciencias y Humanidades



Evaluación del Método Analítico Azul de Molibdeno para la
Cuantificación de Arsénico en el Agua de la Capital de Guatemala

Trabajo de graduación en modalidad de tesis presentado por
Diana Gabriela Rosemberg Gonzalez
para optar al grado académico de Licenciada en
Química

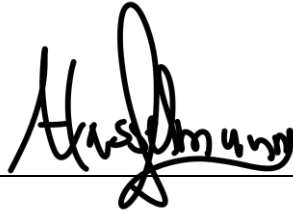
Guatemala,
2023

Vo. Bo.:



(f) _____
Lic. Angelika Hasselmann

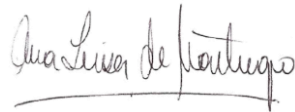
Tribunal Examinador:



(f) _____
Lic. Angelika Hasselmann



(f) _____
Lic. Angelika Hasselmann



(f) _____
Lic. Ana Luisa Mendizabal

Fecha de Aprobación: 2 de junio del 2023

AGRADECIMIENTOS

A Dios. Por haberme dado la sabiduría y fortaleza para lograr llegar a este punto de mi carrera universitaria.

A mis padres. Diana y Herbert, por el sacrificio diario que realizaron para permitirme estudiar y el apoyo incondicional.

A mis hermanos. Guillermo, Sebastián y Camila, por ser una alegría y distracción en los momentos más difíciles.

A mi novio. Estuardo Menendez, por estar cada día a mi lado y ayudarme con todas las partes que yo no entendía, también por celebrar los buenos momentos y alentarme en los malos.

A mis amigos. Por apoyarme con sus conocimientos y energía, y brindarme ayuda y compañía en las largas horas en el laboratorio.

A mis catedráticos. Lic. Ángel Ramírez, Lic. Ana Luisa Mendizabal, Lic. Ingrid Pocasangre y Lic. Irma Orellana, compartir sus conocimientos, apoyarme en distintas partes de esta investigación, y prestarme el espacio y materiales para realizar la metodología. Especialmente a la Lic. Angelika Hasselmann, por estar a mi lado durante todo este trayecto y su apoyo en problemas tanto de la investigación como personales.

ÍNDICE

AGRADECIMIENTOS	vi
LISTADO DE CUADROS	viii
LISTADO DE FIGURAS	ix
RESUMEN.....	x
I. INTRODUCCIÓN.....	1
II. OBJETIVOS	2
III. JUSTIFICACIÓN	3
IV. MARCO TEÓRICO.....	4
A. Arsénico	4
1. Formas arsenicales en agua.....	4
2. Fuentes de exposición	5
3. Toxicidad	5
4. Efectos de intoxicación por arsénico	6
B. Ciudad de Guatemala	7
1. Recurso hídrico	7
2. Contaminación	7
3. Legislación actual	8
C. Métodos para la cuantificación de arsénico.....	8
1. Espectrofotometría UV-Vis	9
2. Método analítico azul de molibdeno	10
V. METODOLOGÍA	12
VI. RESULTADOS	17
VII. DISCUSIÓN	22
VIII. CONCLUSIONES	25
IX. RECOMENDACIONES	26
X. BIBLIOGRAFÍA.....	27
XI. ANEXOS	29

LISTADO DE CUADROS

Cuadro 1. Síntomas de la exposición al arsénico.....	6
Cuadro 2. Documentos oficiales para la regulación y control de calidad del agua en Guatemala...	8
Cuadro 3. Metodologías para la detección y cuantificación de arsénico en aguas y suelos	9
Cuadro 4. Variables medidas en la evaluación del método azul de molibdeno para la cuantificación de arsénico.....	12
Cuadro 5. Coeficiente de determinación calculado para distintos tiempos	17
Cuadro 6. Valores experimentales de absorbancia para las réplicas realizadas.....	17
Cuadro 7. Valores medidos del blanco	18
Cuadro 8. Estadística de regresión para la curva de calibración de azul de molibdeno.....	18
Cuadro 9. Variables medidas para el método azul de molibdeno	19
Cuadro 10. Valores obtenidos para la cuantificación de arsénico en las distintas zonas de Guatemala	20
Cuadro 11. Valores obtenidos para la concentración de arsénico de las zonas 1, 2 y 3	31
Cuadro 12. Valores obtenidos para la concentración de arsénico en las zonas 5, 7 y 8	32
Cuadro 13. Valores obtenidos para la concentración de arsénico en las zonas 9, 10 y 11.....	33
Cuadro 14. Valores obtenidos para la concentración de arsénico en las zonas 12, 14, 15 y 16.....	34

LISTADO DE FIGURAS

Figura 1. Especies de As(III) en función del pH.....	4
Figura 2. Especies de As(V) en función del pH.....	5
Figura 3. Ubicación de la recolección de agua en la capital de Guatemala	14
Figura 4. Curva de calibración para el método azul de molibdeno.....	18
Figura 5. Gráfico de análisis de residuales	19
Figura 6. Coloración amarilla para la prueba de calentamiento t = 4 horas.....	29
Figura 7. Curva de calibración obtenida	30
Figura 8. Curva de calibración para t = 0.167 h.....	37
Figura 9. Curva de calibración para t = 0.333 h.....	37
Figura 10. Curva de calibración para t = 0.5 h.....	38
Figura 11. Curva de calibración para t = 1 h.....	38
Figura 12. Curva de calibración para t = 1.6 h.....	39
Figura 13. Curva de calibración para t = 3 h.....	39
Figura 14. Curva de calibración para t = 3.5 h.....	40
Figura 15. Curva de calibración para t = 4.....	40

RESUMEN

El arsénico (As) es el elemento químico de número atómico 33 y es conocido como un metal pesado dañino para la salud humana y el medio ambiente. En el agua se presenta generalmente en su forma inorgánica trivalente y pentavalente, siendo la primera varias veces más tóxica que la forma pentavalente.

Un alto consumo de arsénico ya sea ingerido, inhalado o absorbido, puede generar diversas enfermedades, como el cáncer y el hidroarsenicismo crónico regional endémico (HACRE). La contaminación del agua en Latinoamérica es uno de los temas urgentes de preocupación ambiental y de salud social, ya que estas enfermedades pueden llevar a que el crecimiento socioeconómico, la sostenibilidad de los suelos y el desarrollo de la agricultura se vean severamente afectados, por lo que el análisis de arsénico en el agua es de suma importancia, para lograr tomar medidas efectivas y eficientes para el tratamiento del agua.

En Guatemala se realizó un análisis en el 2021 sobre la concentración de arsénico en el agua, sin embargo, no se especificaron las zonas de mayor riesgo, que podría servir para identificar las fuentes de exposición, entonces en este trabajo se realizó una labor de identificar aquellas zonas con la mayor concentración de arsénico en el agua.

Existen varias formas de cuantificar arsénico en el agua, pero la mayoría requieren equipo caro y personal capacitado, por lo que se decidió probar el método analítico azul de molibdeno, que utiliza espectroscopía UV-Vis y reactivos más comunes.

Se determinó que este método no es capaz de cuantificar arsénico en concentraciones bajas, debido a la sensibilidad del equipo utilizado, pero sí es capaz de detectarlo en concentraciones desde 0.007 ppm. A partir de esto, se concluyó que las zonas de mayor riesgo son las zonas 7, 11 y 16, y se insta a las autoridades pertinentes a que realicen un estudio para identificar la fuente de contaminación y revisen las normas y leyes para el monitoreo y tratamiento del agua en la capital de Guatemala.

I. INTRODUCCIÓN

El agua es un recurso natural esencial para la vida de los seres humanos. En Guatemala, el abastecimiento de agua proviene en su mayoría de aguas superficiales, especialmente en aquellas comunidades asentadas alrededor de ríos y lagos cuya agua no proviene de la red de acueducto. La contaminación de los cuerpos de agua en Guatemala sigue siendo un problema serio, a pesar de las leyes y reglamentos estipulados en el manual de legislación ambiental de Guatemala (Fernández Roca, 2008; Leonel et al., 2015).

Existen varias metodologías que se pueden utilizar para la cuantificación de arsénico, sin embargo, la mayoría utilizan equipos caros, como la espectroscopía de absorción atómica con generación de hidruros, absorción atómica con horno de grafito, espectroscopía de emisión plasma inductivo de argón, entre otros. Una de las metodologías más accesibles es la espectrofotometría UV-VIS, sin embargo, los reactivos pueden llegar a ser complicados de conseguir, por lo que en esta investigación se evaluará el método de azul de molibdeno que mantiene el límite de detección de 0.01 ppm que es límite de concentración máximo recomendado por la OMS, utilizando reactivos más accesibles (Altamirano Guerrero, 2021).

II. OBJETIVOS

A. Objetivo general

- Evaluar que el método analítico azul de molibdeno es adecuado para detectar trazas de arsénico en el agua de la ciudad de Guatemala.

B. Objetivos específicos

- Calcular la linealidad e intervalo, límite de detección y límite de cuantificación para el método analítico azul de molibdeno para la cuantificación de la concentración de arsénico en el agua de la ciudad de Guatemala.
- Determinar el tiempo de calentamiento adecuado para la oxidación del arsénico y naranja de metilo en el método azul de molibdeno.
- Identificar el área de la ciudad de Guatemala con mayor contaminación de arsénico en el agua.

III. JUSTIFICACIÓN

El arsénico (As) es un elemento químico que se genera tanto de manera natural como por actividades humanas. En sus formas orgánicas, el arsénico es menos tóxico y se encuentra en organismos como peces y moluscos, sin embargo, en las formas inorgánicas, como el trióxido de arsénico (As_2O_3), es altamente tóxico y se encuentra frecuentemente en aguas naturales. Este compuesto, puede generar distintas enfermedades, como el cáncer e hidroarsenicismo crónico regional endémico (HACRE) (Gürkan et al., 2015; Marta & Litter, 2010; Agencia para Sustancias Tóxicas y el Registro de Enfermedades [ATSDR], 2007).

En Guatemala se observa una contaminación alarmante de arsénico, por ejemplo, en el 2022 se analizaron varios compuestos químicos en distintos sitios del río Villa Lobos, entre ellos el arsénico donde se reportó que el límite estaba abajo del establecido por el Acuerdo Gubernativo No. 236-2006, sin embargo, este mismo acuerdo determina que el límite máximo permisible de arsénico es de 0.1 mg L^{-1} , que es diez veces mayor al permitido por la OMS, 0.01 mg L^{-1} (Brammer & Ravenscroft, 2009; Fundación para la Conservación del Agua de la Región Metropolitana de Guatemala [FUNCAGUA], 2022; Acuerdo Gubernativo 236-2006).

Esto genera una necesidad de detectar y cuantificar el arsénico de manera rápida, continua y económica, para asegurar el mantenimiento del agua, de manera que se puedan aplicar metodologías para la remoción del arsénico en caso de ser necesario.

IV. MARCO TEÓRICO

A. Arsénico

El arsénico (As) es un elemento químico con número atómico 33 y peso molar de $74.9216 \text{ g mol}^{-1}$. Se encuentra en la familia del nitrógeno y se clasifica como un metaloide, aunque frecuentemente se le llama metal pesado. La mayoría de los compuestos del arsénico se presentan como polvos de color blanco con puntos de fusión y evaporación altos. No tienen olor y la mayoría carece de sabores característicos, por lo que es difícil reconocerlos cuando están en los alrededores (ATSDR, 2007).

1. Formas arsenicales en agua

El arsénico se puede presentar en distintos estados de oxidación (-III, 0, III, V) y en formas orgánicas e inorgánicas, ya sea en aire, agua, suelos, plantas y animales.

a. Formas orgánicas

Los compuestos orgánicos contienen arsénico unido a un átomo de carbono por enlaces covalentes, por lo que se puede encontrar en su forma trivalente (As(III)), o pentavalente (As(V)). Las especies orgánicas se encuentran en varios lugares, incluyendo tejidos biológicos, y una gran cantidad de alquilos y arilderivados se sintetizan como biocidas en agricultura para Latinoamérica (Litter & Morgada, 2009).

b. Formas inorgánicas

Las formas inorgánicas se encuentran generalmente en aguas naturales, donde se disuelven y forman oxianiones, principalmente As(III) y As(V), aunque también se pueden encontrar As(0) y As(-III). Tanto el As(III) como el As(V) se pueden encontrar en agua y suelos, sin embargo, la primera se puede encontrar también en seres vivos (Litter & Morgada, 2009).

El estado de oxidación del arsénico depende, en parte, del pH. Cuando el pH del agua se encuentra en el rango de 6.3-7.5 se favorece la presencia de especies arsenicales, como se observa en la Figura 1 (Agreda et al., 2005).

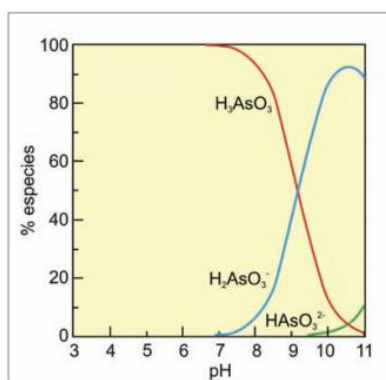


Figura 1. Especies de As(III) en función del pH

(Litter & Morgada, 2009)

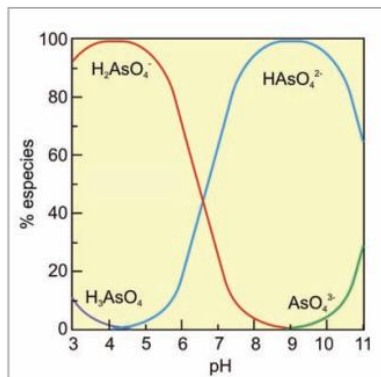


Figura 2. Especies de As(V) en función del pH

(Litter & Morgada, 2009)

2. Fuentes de exposición

a. En el medio ambiente

El arsénico es aproximadamente $5 \times 10^{-4}\%$ de la corteza terrestre y es de los 20 elementos más abundantes de la tierra, por lo que no es extraño que una de las fuentes de exposición sea completamente natural, como la meteorización a partir de rocas parentales o volcanes (Bundschuh et al., 2008; Santos Fiestas & Millones Ñiquen, 2019).

b. Por actividad humana

Anteriormente, una de las formas de exposición con mayor fama era la homicida, siendo el caso más conocido el envenenamiento de Napoleón Bonaparte en la isla de Elba; cabe mencionar que esta técnica ha perdido su popularidad debido al avance en la detección del arsénico en el cuerpo al momento de la autopsia (De La Rosa, 2018).

Actualmente, a mayor cantidad de arsénico de fuentes antropogénicas se debe a preservativos de madera, pesticidas y plaguicidas (que aunque se reguló su uso en Estados Unidos, otros países lo siguen utilizando), industria, minería, colorantes, metalurgia, transistores, láser, semiconductores y municiones, en las que existe en sus formas inorgánicas As(III) y As(V). Estas fuentes ocasionan un incremento en la cantidad de arsénico en la comida, agua y aire, que a su vez puede afectar a los consumidores (ATSDR, 2007; Agreda et al., 2005; Gürkan et al., 2015).

3. Toxicidad

Como se mencionó anteriormente, las formas inorgánicas son más tóxicas que las formas orgánicas del arsénico. Aunque la toxicidad depende de cada especie química, se sabe que el As (III) es 10 veces más tóxico que el As(V), y a pesar de que se conocen las propiedades tóxicas del arsénico, se sigue utilizando en productos agrícolas e industria (Agreda et al., 2005; Bundschuh et al., 2008; De la Rosa, 2018).

La exposición por inhalación es la vía de ingreso más importante del arsénico y sus compuestos, ya que su absorción aumenta por el tamaño de las partículas, especialmente de la arsina, por su solubilidad y forma. Las partículas más grandes se depositan en el tracto respiratorio y dependiendo de su solubilidad se absorben en grandes cantidades. En el pulmón, las partículas menores a $7\mu\text{g}$ se absorben entre el 75 y 85% (Ramírez, 2013).

Varios compuestos de As (III) son solubles en lípidos mientras que el As(V) se absorbe por el intestino,

entre ambos, se absorbe en un 95%. En caso de la piel, los compuestos arsenicales húmedos se absorben bien, si la piel está seca, solo alcanza 2% (Ramírez, 2013).

Una vez absorbido, el arsénico llega a la sangre y se combina con las globulinas, que lo lleva al hígado, pulmones, riñones y bazo, también puede llegar al tejido óseo y compite con el fósforo hasta desplazarlo y se puede almacenar por años. En aproximadamente 30 horas, se deposita en el cabello y las uñas, por lo que el análisis en secciones de pelo puede indicar el tiempo transcurrido desde el inicio de la exposición (Ramírez, 2013).

La biodisponibilidad del arsénico inorgánico varía dependiendo de la matriz donde se encuentre, ya sea comida o agua. La ingestión del arsénico dependerá tanto del estado de oxidación del arsénico como de las reacciones de metilación en el cuerpo humano. El sitio principal de metilación es el hígado, y algunos estudios sugieren que la metilación se puede limitar a $0.2 - 1 \text{ mg kg}^{-1}$. Al comparar el nivel de absorción por ingestión, se logró identificar una relación entre la acumulación de arsénico en el cuerpo y la edad (Mandal & Suzuki, 2002).

La toxicidad del arsénico depende de la vía de ingreso, la valencia y especie química. En general, el arsénico forma enlaces covalentes con el azufre, que permite el ingreso del arsénico a reacciones bioquímicas que involucran agua (Ramírez, 2013).

a. Cuadro clínico

En el Cuadro 1. se muestran los síntomas correspondientes a cada área del cuerpo, después de consumir una dosis específica.

Cuadro 1. Síntomas de la exposición al arsénico

Área afectada	Síntomas	Fuente
Sistema cardiovascular	Vasodilatación que conduce a una vasoconstricción refleja.	(De La Rosa, 2018)
Sistema digestivo	Diarrea y sangrado, irritación del estómago y los intestinos, junto con dolor de estómago, náusea y vómitos.	(ATSDR, 2007; De La Rosa, 2018)
Riñones	Necrosis tubular aguda, nefritis y cáncer.	(De La Rosa, 2018; Ramírez, 2013)
Piel	Hiperqueratosis palmo-plantar, hiperpigmentación, atrofia y cáncer.	(Agreda et al., 2005; De La Rosa, 2018)
Sistema nervioso	Resorción de mielina, destrucción de cilindroejes, sensación de hormigueo en las manos y los pies y encefalopatía.	(ATSDR, 2007; De La Rosa, 2018; Ramírez, 2013)
Hígado	Necrosis perilobulillar, cirrosis y cáncer de hígado.	(ATSDR, 2007; De La Rosa, 2018)
Uñas	Líneas de Mee.	(De La Rosa, 2018)
Pelo	Alopecia tardía	(De La Rosa, 2018)
Sistema excretor	Cáncer de vejiga	(Agreda et al., 2005)
Pulmones	Cáncer de pulmones	(Agreda et al., 2005)

4. Efectos de intoxicación por arsénico

a. HACER

El Hidroarsenicismo Crónico Regional Endémico (HACRE) es una enfermedad grave provocada por el consumo de arsénico en el agua durante una gran cantidad de tiempo. Existen cuatro etapas en el desarrollo

del HACRE según el esquema de Levell y Clarke; período prepatogénico (exposición a concentraciones altas de As), período preclínico (no se muestran síntomas, pero es detectable en el tejido y la orina), período clínico (manifestaciones en la piel) y período de complicaciones (síntomas claros y desarrollo de tumores o cáncer) (García, 2011).

En las primeras etapas, si el paciente cambia su fuente de agua por una no contaminada, se espera una recuperación casi completa. En el caso del período de complicaciones, si se manifiesta el cáncer, la única solución es el tratamiento inmediato para tratar de reducir secuelas (García, 2011).

Esta enfermedad se caracteriza por efectos dérmicos, como la hiperqueratosis palmo-plantar (acumulación excesiva de queratina en las palmas de la mano y las plantas de los pies) e hiperpigmentación arsenical (aumento de melanina en la piel a causa del arsénico) (García, 2011).

5. Consecuencias en la sociedad.

En Latinoamérica, la contaminación del agua es uno de los temas urgentes de preocupación ambiental, ya que el uso del agua potable y otras aplicaciones disminuye, por lo que el crecimiento socioeconómico, la sostenibilidad de los suelos y el desarrollo de la agricultura se ven severamente afectados. En países ganaderos, además, la preocupación aumenta debido al uso de agua contaminada con arsénico que puede afectar, no solo a los suelos, sino también al ganado (Bundschuh et al., 2008).

Por otro lado, la mayoría de las personas que se ven afectadas por la contaminación de arsénico en el agua se encuentran en áreas rurales, lugares donde las condiciones no permiten la instalación de plantas de tratamiento eficientes (Bundschuh et al., 2008).

B. Ciudad de Guatemala

La ciudad de Guatemala se encuentra en el departamento de Guatemala, Guatemala. En el 2022 tenía una cantidad de 3,036,405 habitantes, que es más del 20% de la población total del país. Éste se divide en 22 zonas; las zonas 20, 22 y 23 no forman parte de la ciudad de Guatemala, sino de distintos municipios alrededor.

1. Recurso hídrico

La Región Metropolitana de Guatemala (RMG) contiene 12 municipios, incluyendo la ciudad de Guatemala. En el 2022 se le realizó un análisis exhaustivo del recurso hídrico a la RMG y se identificaron 16 microcuencas (FUNCAGUA, 2022).

La ciudad de Guatemala está delimitada por tres subcuencas; la del río Motagua, la vertiente del Caribe y la cuenca del río María Linda. Además, la ciudad se abastece de tanto aguas superficiales como subterráneas, las aguas superficiales se obtienen principalmente de los ríos Xayá, Pixcayá, Pansalic y Teocinte, las aguas subterráneas se obtienen de acuíferos en el Valle de la Ermita y varios pozos (FUNCAGUA, 2022).

Debido a distintos factores, el agua en Guatemala ha disminuido parcialmente, a eso se le suma que la demanda doméstica ha aumentado, y aunque no existe un dato específico sobre el consumo de agua de manera doméstica en la RMG, se realizó un estimado del consumo de la capital basándose en la zona 10 de la ciudad capital. En conclusión, se determinó que el consumo mensual de agua ha aumentado significativamente en los últimos años, lo que genera una necesidad de agua limpia y de calidad (FUNCAGUA, 2022).

2. Contaminación

En el 2022, se midió la calidad del agua en la RMG. Se midieron un total de 8 unidades hidrológicas, de las cuales 4 no tienen datos, dos tienen calidad regular, una calidad mala y únicamente una de buena calidad.

También se analizaron varios elementos químicos en el agua del río Villalobos, en el que se reportó que todos los químicos que se midieron estaban debajo de los límites permisibles según el reglamento de Aguas Residuales, incluyendo el arsénico, sin embargo, al revisar este reglamento, se observa que el límite máximo permisible de arsénico es de 0.1 mg L^{-1} , 10 veces más alto que la cantidad recomendada por la OMS (FUNCAGUA, 2022; Acuerdo gubernativo 236-2006).

Esta información demuestra la falta de regulación y control del agua en Guatemala y requiere una inmediata revisión, ya que cantidades altas de arsénico en el agua (más el resto de los elementos que también se encuentran por encima de las cantidades recomendadas) pueden provocar varios padecimientos en la población, especialmente si esta agua se utiliza para lavar o cocinar, como es el caso en áreas rurales.

3. Legislación actual

Actualmente, existen varios reglamentos y acuerdos gubernativos que regulan y controlan la calidad del agua de Guatemala. En el Cuadro 2 se observan algunos de estos.

Cuadro 2. Documentos oficiales para la regulación y control de calidad del agua en Guatemala

Documento	Título	Objetivo
Acuerdo gubernativo 178-2009	“Reglamento para la certificación de la calidad del agua para consumo humano en proyectos de abastecimiento”	Establecer criterios aplicables al proceso de certificación de la calidad del agua para consumo humano.
Decreto 90-97, artículo 88	Código de Salud	Todo proyecto de abastecimiento de agua debe contar con un certificado de la calidad del agua extendido por el Ministerio de Salud pública y Asistencia Social
Acuerdo Gubernativo 236-2006	“Reglamento de las descargas y reuso de aguas residuales y de la disposición de lodos”	Establecer criterios y requisitos para la descarga y reuso de aguas residuales y disposición de lodos. Establecer mecanismos de evaluación, control y seguimiento para la conservación y mejoramiento del recurso hídrico.
Acuerdo ministerial 523-2013	“Manual de especificaciones para la vigilancia y el control de la calidad del agua para consumo humano”	Establecer especificaciones técnicas necesarias para la vigilancia y control de calidad del agua para consumo humano en la República de Guatemala.

A pesar de los documentos, el mantenimiento del agua no tiene la calidad deseada. Un estudio del 2022 analizó el agua de 113 hogares en la capital de Guatemala y se analizaron 20 metales y 25 polifluoroalquilos (PFAS), donde se determinó que al menos un 63% de los hogares tenían al menos un metal arriba del límite permisible según los estándares guatemaltecos. El arsénico y el plomo superaban el límite en un 33.6% y 8.9% respectivamente, lo que llevó a la conclusión que el agua potable de la ciudad de Guatemala puede representar un riesgo a la salud pública (Redmon et al., 2022).

C. Métodos para la cuantificación de arsénico

El arsénico es un elemento difícil de cuantificar individualmente debido a la gran cantidad de formas orgánicas e inorgánicas que puede hacer. Para el caso de los compuestos inorgánicos, las formas más comunes de caracterizar son; para el As (III) el As_2O_3 y el $AsCl_3$, en el caso del As(V) son el H_3AsO_4 y los arsenatos (Agreda et al., 2005).

Existen varias metodologías para la detección y cuantificación del arsénico, algunas se describen en el Cuadro 3.

Cuadro 3. Metodologías para la detección y cuantificación de arsénico en aguas y suelos

Metodología	Descripción
Métodos espectrofotométricos UV-Vis	Simple y económicas basadas en reacciones colorimétricas.
Absorción atómica-generación de hidruros (AAS-HG)	Requiere instrumentos relativamente económicos. Es una metodología versátil y excelente para la detección de arsénico total.
Absorción atómica con horno de grafito (AAS-GF)	Tiene límites de detección mayores al AAS-HG y requiere analistas altamente capacitados.
Espectroscopía de emisión-plasma inductivo de argón (ICP-OES)	Requiere equipo costoso y analistas capacitados. Tiene buenos límites de detección y amplia linealidad dinámica, por lo que analiza rangos de concentración de arsénico variables.
Espectrometría de masas con plasma inductivamente acoplado (ICP-MS)	Es conveniente para aguas, con excelentes límites de detección, pero requiere equipo muy costoso, instalaciones especiales y capacitación compleja.
Métodos de espectroscopía con rayos X	Se usan para registrar <i>in situ</i> datos primarios sobre el entorno químico del arsénico.

Fuente: (Litter & Morgada, 2009)

1. Espectrofotometría UV-Vis

La espectrofotometría se basa en la interacción entre la radiación electromagnética y la materia. La radiación electromagnética se caracteriza por una longitud de onda (λ), una frecuencia (ν) o una energía (E), cuya relación está dada por la ecuación de Planck (Skoog et al., 2015).

Ecuación 1. Ecuación de Planck

$$E = h\nu = hc \lambda^{-1}$$

Donde:

E = energía transportada por un fotón.

h = constante de Planck ($6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$)

c = velocidad de la luz ($2.998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$)

λ = longitud de onda [m]

ν = frecuencia de la radiación [s^{-1}]

La espectroscopía UV-Vis es un método de absorción, que quiere decir que absorbe la radiación, en este caso ultravioleta y visible, cuya longitud de onda se encuentra entre los 100 y los 800 nm . Esta longitud de onda es el resultado de las interacciones entre los fotones y los electrones que participan directamente en los enlaces o que están alrededor de átomos como oxígeno, azufre, nitrógeno y halógenos (Skoog et al., 2015).

Para las especies inorgánicas, los iones y complejos de elementos de las dos primeras series de transición absorben bandas anchas de radiación visible, por lo que presentan coloración. La absorción ocurre cuando los electrones realizan transiciones entre los orbitales d . La diferencia de energía entre los dos orbitales d depende de la posición del elemento en la tabla periódica, valencia y su ligando (Skoog et al., 2015).

Las mediciones realizadas con espectrofotometría UV-Vis son útiles para detectar grupos cromóforos o compuestos con coloración, por lo que generalmente es necesario realizar un tratamiento inicial de la muestra para generar los colores (Skoog et al., 2015).

La base de la espectrofotometría UV-Vis en el análisis cuantitativo está dado por la ley de Beer-Lambert, que dice que la absorbancia de una solución es directamente proporcional a la concentración del analito en esa solución. Cuando un haz de luz UV-Vis atraviesa una solución, la intensidad (I) que atraviesa la muestra es menor que la luz inicial (I_0). La transmitancia T está relacionada con la absorbancia A según la siguiente expresión

$$A = -\log T = -\log(I/I_0)$$

Para facilitar su uso, se utiliza la absorbancia en lugar de la transmitancia, ya que A está linealmente relacionada con la concentración del analito a una longitud de onda determinada, por lo que se puede decir que:

$$A = -\log_{10}(I/I_0) = \varepsilon cl$$

Donde:

A = absorbancia medida

I = intensidad de la luz transmitida

I_0 = intensidad de la luz incidente

ε = coeficiente de absorción molar

l = longitud del camino óptico

c = concentración de la sustancia absorbente [$mol L^{-1}$]

Para cada analito absorbente y longitud de onda λ , ε es una constante, por lo que la absorbancia y el coeficiente de absorción son a veces definidos en términos de logaritmo natural. El espectrofotómetro UV-Vis registra entonces longitudes de onda a las cuales se registra la absorción y el espectro resultante se registra como absorbancia (A) vs. longitud de onda (λ), de la cual se puede despejar la concentración y obtener el análisis cuantitativo (Castro et al., 2009).

2. Método analítico azul de molibdeno

El método espectrofotométrico azul de molibdeno consiste en la formación del complejo $H_{13}[AsMo_{12}O_{40}]$ cuya formación se propone en la Reacción 1 (ver en pág. 39). Esta molécula tiene una geometría conocida como la estructura de Keggin que se muestra en la Figura 3.

El procedimiento consiste en poner a reaccionar el arsénico con el molibdato de amonio y posteriormente sulfato de hidracina, para formar el complejo azul. Debido a que este complejo contiene el arsénico, la intensidad del color es proporcional a la concentración del arsénico en la muestra (Cotton et al., 1999; Mercado, 2013).

Al acidificar la muestra, se estabilizan los compuestos de As(III) y As(V) en sus compuestos H_3AsO_3 y H_3AsO_4 , respectivamente (Agreda et al., 2005).

a. Limitaciones del método

Este método, debido a la naturaleza del arsénico, es sensible a la luz y a otros compuestos, como fosfatos y compuestos de hierro, ya que estos también pueden formar complejos con el anión $[X^{n+}Mo_{12}O_{40}^{(8-n)-}]$, sin embargo, debido a que el arsénico se une cuando se tiene el anión $[X^{n+}Mo_{12}O_{42}^{(12-n)-}]$, y éste solo puede formar enlaces con el Ce(IV), Th(IV) y U(IV), este paso ayuda a la disminución de contaminación (Cotton

et al., 1999).

Debido a la naturaleza de los reactivos, tampoco se logra diferenciar entre las especies de arsénico As(III) y As(V). Esto se debe a que se requerirían reactivos de mayor toxicidad y equipo especial para este tipo de análisis. Por esta razón se agrega el bromato de potasio para tratar de oxidar el As(III) a As(V) y poder obtener la mayor cantidad de H_3AsO_4 posible para medir el arsénico total (Castro et al., 2009).

Cabe mencionar que no se encontró literatura sobre las especificaciones del método, específicamente el tiempo de calentamiento del arsénico y naranja de metilo, por lo que se tuvo que experimentar varias veces hasta obtener las condiciones apropiadas para el método.

V. METODOLOGÍA

A. Sitio de estudio

Las muestras fueron recolectadas en las zonas 1, 2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15 y 16 de la capital de Guatemala. El análisis se realizó en el laboratorio C1-201 de la Universidad del Valle de Guatemala (UVG).

B. Sujeto de estudio

El sujeto de estudio fue el agua de uso diario o “agua de chorro” de las distintas zonas de Guatemala.

C. Diseño, enfoque y tipo de investigación

Se realizó una investigación cuantitativa descriptiva en la que se realizaron mediciones para determinar la concentración de arsénico en las distintas muestras de las zonas de la capital de Guatemala.

D. Tipo y tamaño de muestra

La muestra fue de tipo probabilístico simple, ya que se quiso analizar la mayor variedad de fuentes de agua en la capital de Guatemala. El tamaño de la muestra se calculó con la ecuación estadística de muestras de una población finita con el Cálculo 10 (ver pág. 46), siendo la población las 22 zonas de la capital de Guatemala.

Se tomó la decisión de excluir las zonas 18, 24 y 25 por motivos de seguridad y protección del investigador.

E. Variables

Cuadro 4. Variables medidas en la evaluación del método azul de molibdeno para la cuantificación de arsénico

Variable	Def. Conceptual	Def. Operacional
Línealidad e intervalo	Es el intervalo de concentraciones en la que un analito se puede determinar utilizando una curva de calibración lineal (Skoog, et al, 2015).	Valores obtenidos de la ecuación lineal de la curva de calibración.
Límite de detección	La menor concentración que se puede detectar a un cierto nivel de confianza (Skoog, et al, 2015).	La menor cantidad de arsénico que se encontrará en la muestra, obtenida por análisis estadístico.
Límite de cuantificación	La menor cantidad de analito que se puede cuantificar con exactitud y precisión (Skoog, et al, 2015).	La menor cantidad de arsénico que se puede encontrar con exactitud y precisión con la metodología, obtenida por análisis estadístico.
Concentración de arsénico en las zonas de la capital de Guatemala	Cantidad de arsénico en las zonas 1, 2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15 y 16	Aplicar a las distintas muestras el tratamiento y luego analizarlo con un espectrómetro UV-VIS.

F. Hipótesis

H_1 : El método azul de molibdeno es adecuado para cuantificar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala.

H_2 : El método azul de molibdeno es adecuado para detectar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala.

Para la evaluación del método azul de molibdeno, se seleccionó el estudio realizado por Redmon et al, realizado en 2021 sobre la calidad del agua en Guatemala. Este midió, entre otros metales, el contenido de arsénico en el agua, de manera que se compararon los resultados obtenidos en ambos estudios para el desempeño del método.

G. Instrumentos de medición

Se evaluó la metodología de azul de molibdeno por espectroscopía UV-Vis por medio de un espectrómetro UV-Vis marca Agilent con una incertidumbre de ± 0.0005 A

H. Metodología

1. Recolección de las muestras

Se tomaron 30 muestras de agua de 15 mL de las zonas 1, 2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15 y 16 utilizando las medidas descritas en Silva & Ciminelli, 2009.

Cada muestra se tomó de agua de uso diario en las ubicaciones de la Figura 3.

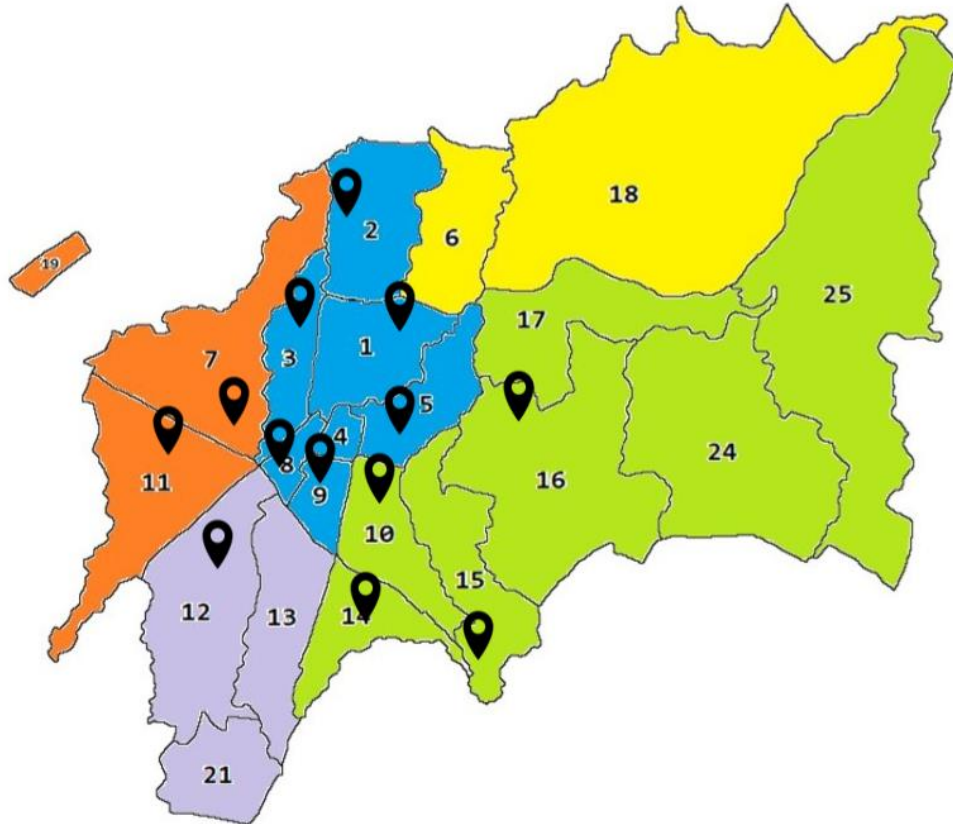


Figura 3. Ubicación de la recolección de agua en la capital de Guatemala

2. Curva de calibración

El método azul de molibdeno se realizó usando la Norma NTE INEN 958:1982 (2012).

Se preparó las siguientes soluciones:

- Naranja de metilo ($1g L^{-1}$)
- Hidróxido de amonio diluido (1:1 en volumen)
- Ácido clorhídrico diluido (1:9 en volumen)
- Bromato de potasio ($20 g L^{-1}$)
- Molibdato de amonio ($5 g L^{-1}$)
- Sulfato de hidracina ($1 g L^{-1}$)

Es importante que las soluciones de molibdato de amonio y sulfato de hidracina sean preparadas el mismo día de uso. El molibdato de amonio se puede oxidar al estar expuesto a la luz y al agua y puede afectar la formación del complejo azul de molibdeno, mientras que el sulfato de hidracina es sensible a la degradación cuando se expone a la humedad y pierde su capacidad para reducir el arsénico (Instituto Ecuatoriano de Normalización [INEN], 2012).

Para la preparación de la solución madre de arsénico se tomó 0.1320 g de As_2O_3 en un balón volumétrico de 1 L. Se añadió 10 mL de HCl concentrado, se disolvió y aforó. Posteriormente, de esta solución se tomaron 100 mL y se colocaron en otro balón volumétrico de 1 L, donde se agregó 40 mL de HCl concentrado y se aforó.

De la segunda solución de arsénico se tomaron alícuotas que al disolver en 50 mL contuvieran una concentración de 0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 y 0.1 $mg L^{-1}$, que se transfirieron a balones volumétricos de 50 mL. A cada balón se le agregó 2 gotas de la solución de naranja de metilo y se neutralizó con la solución de hidróxido de amonio hasta observar que el contenido presentó el color amarillo característico.

Se añadió gota a gota la solución de ácido clorhídrico hasta que el líquido cambió a rojo e inmediatamente se agregaron 10 mL de la misma solución de ácido clorhídrico y 1.0 mL de la solución de bromato de potasio.

En un baño de agua, para mantener la temperatura uniforme en todos los calibradores, se calentaron los balones a $50^{\circ}C$ por para permitir la oxidación del naranja de metilo y el arsénico.

Pasado el tiempo, en caliente se agregó 5.0 mL de la solución de molibdato de amonio y se mezcló bien para homogenizar y luego se agregó 2.0 mL de la solución de sulfato de hidracina. Se mezcló bien y se aforó.

Después, se puso a hervir en baño de agua y se dejaron los calibradores por 10 minutos, se retiró y dejó enfriar a temperatura ambiente.

Finalmente se tomó 5 mL de cada calibrador y se colocó en la celda de absorción para tomar las lecturas a 660 nm ya que la máxima absorbancia del complejo azul de molibdeno se presenta en esta longitud de onda.

Para el blanco se tomaron 10 mL en un balón de 50 mL a los que se les aplicó el mismo procedimiento descrito anteriormente.

3. Cuantificación de arsénico en las muestras de agua

Para cada una de las muestras de 15 mL, se tomaron 10 mL y se colocaron en balones de 50 mL, a los que se les realizó el mismo procedimiento mencionado en la sección anterior.

Por motivos de espacio en el baño de agua se midieron 6 muestras a la vez.

4. Análisis de datos

Se realizó una regresión lineal para la curva de calibración y se obtuvo la ecuación de la regresión, para poder sustituir los datos y obtener los valores de las muestras.

Se calculó la sensibilidad de calibración y analítica, además de los límites de detección y cuantificación (ver pág. 28).

Finalmente, se decidió comparar el método azul de molibdeno con el estudio realizado por Redmon et al, 2021, en el agua de la ciudad de Guatemala para determinar si el método analizado logra obtener los mismos datos de la media muestral obtenida por Redmon et al., el cual se realizó midiendo el agua de 20 zonas de la capital por medio de espectrometría ICP-MS, donde se detectó arsénico en un rango de 0.3-29.3 ppb con una media muestral de 7.4 ppb.

VI. RESULTADOS

A. Curva de calibración

Debido a la falta de metodología con respecto al tiempo de calentamiento, o bien la apariencia esperada para la oxidación del naranja de metilo y al arsénico en la metodología, se realizó la curva de calibración a distintos tiempos de calentamiento.

Cuadro 5. Coeficiente de determinación calculado para distintos tiempos

Tiempo (h)	R^2
0.167	0.5918
0.333	0.6708
0.5	0.7709
1	0.6293
1.667	0.9576
3	0.9874
3.5	0.9923
4	0.9129

Como se observa en el Cuadro 5, el tiempo que provee el mejor coeficiente de determinación fue de 3 horas y media, por lo que se utilizó como estándar para el procedimiento aplicado a la curva y todas las muestras medidas.

Utilizando el tiempo de calentamiento para la oxidación del naranja de metilo y arsénico seleccionado anteriormente, se realizó la curva de calibración con las concentraciones 0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08 y 0.1 $mg L^{-1}$, en triplicado.

Cuadro 6. Valores experimentales de absorbancia para las réplicas realizadas

Concentración (ppm)	V (mL)	Absorbancia (± 0.0005)	Absorbancia (± 0.0005)	Absorbancia (± 0.0005)
0.01	0.0518	0.000	0.000	0.000
0.02	0.1035	0.002	0.002	0.001
0.04	0.2071	0.005	0.006	0.005
0.06	0.3106	0.009	0.010	0.010
0.08	0.4142	0.015	0.015	0.015
0.1	0.5177	0.017	0.018	0.017

En el Cuadro 6 se pueden observar los datos obtenidos al realizar la curva de calibración (Figura 4). Los volúmenes se midieron con micropipetas de rango 100 – 1000 $\pm 0.5 \mu L$ y 10 – 100 $\pm 0.05 \mu L$ para mayor exactitud en las concentraciones. Se realizó en triplicado.

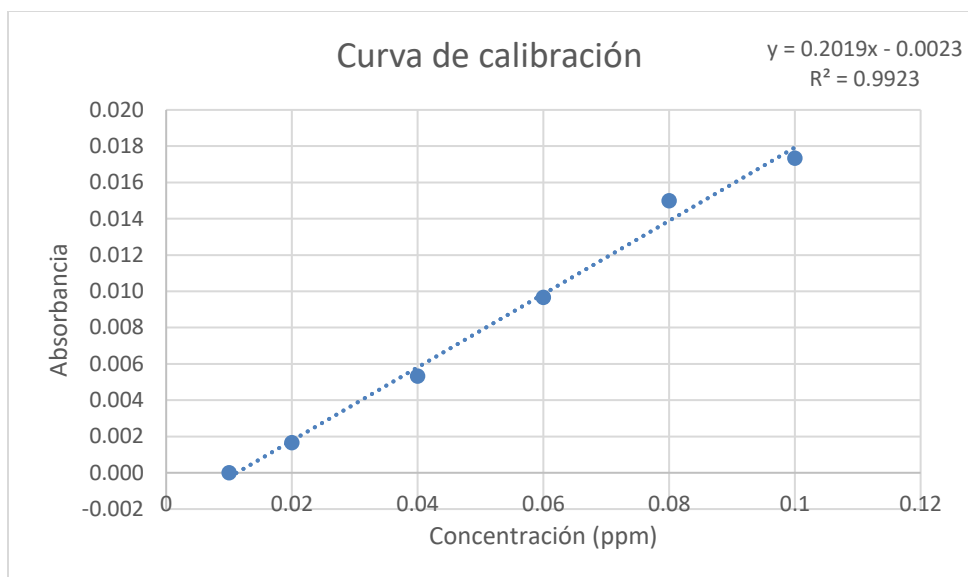


Figura 4. Curva de calibración para el método azul de molibdeno

La ecuación del modelo es $y = 0.2019x - 0.0023$ con un coeficiente de determinación de $R^2 = 0.9923$, lo que significa que el modelo explica el 99.23% de la variabilidad de la absorbancia en ausencia de otras variables.

Para calcular los límites de cuantificación y detección se midió el blanco 30 veces, para asegurar que los resultados se comporten de manera normal, cumpliendo el teorema de límite central.

Cuadro 7. Valores medidos del blanco

Valores	
Sbl	-0.0006
sbl	0.00049827

Donde:

Sbl: señal media del blanco (30 repeticiones)

sbl: desviación estándar de medidas repetidas del blanco

Por medio de estos datos se calcularon los valores del límite de detección y cuantificación donde se obtuvo los valores de 0.007 ppm y 0.025 ppm respectivamente.

Cuadro 8. Estadística de regresión para la curva de calibración de azul de molibdeno

Estadísticas de la regresión	
Coefficiente de correlación múltiple	0.996147585
Coefficiente de determinación R^2	0.992310011
R^2 ajustado	0.990387514
Error típico	0.000693194
Observaciones	6

En el Cuadro 8 se observa que el coeficiente de correlación indica que existe una relación fuerte entre la concentración de arsénico y la absorbancia. También se puede observar que el error típico es de 0.000693, que significa una variabilidad baja en los datos de la curva de calibración.

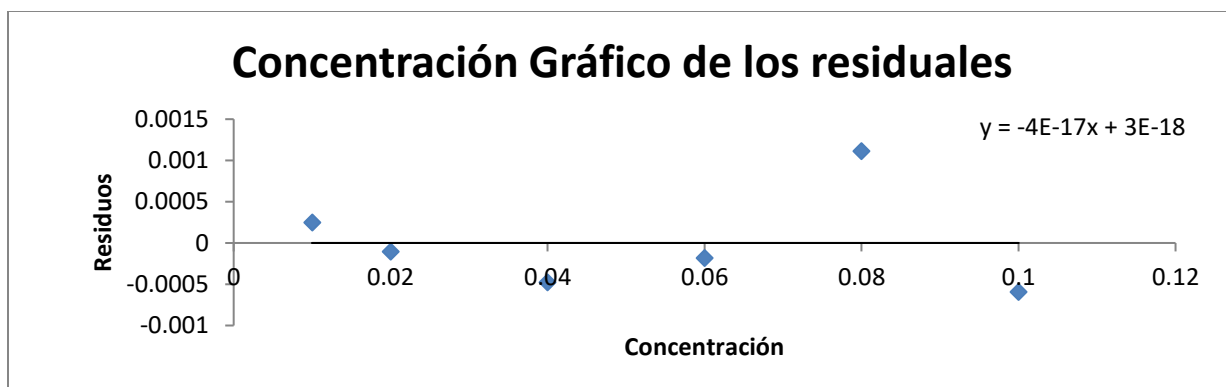


Figura 5. Gráfico de análisis de residuales

En la Figura 5 se puede apreciar una línea de tendencia de pendiente prácticamente 0, por lo que los residuos se distribuyen homogéneamente y el modelo se ajusta bien a los datos.

B. Variables del método azul de molibdeno

Cuadro 9. Variables medidas para el método azul de molibdeno

Sensibilidad	
Calibración	0.202 unidades ppm ⁻¹
Analítica	524.55 ppm
Límite de detección	
Señal mínima detectable	0.001 ppm
Límite de detección	0.007 ppm
Límite de cuantificación	
Señal mínima de cuantificación	0.004 ppm
Límite de cuantificación	0.025 ppm
Rango dinámico	0.075 ppm
Límite de linealidad	0.1 ppm

El valor de sensibilidad de calibración se obtuvo a partir de la pendiente de la curva y el límite de linealidad es el calibrador de mayor concentración utilizado, el resto de variables se obtuvieron utilizando los Cálculos 3 a 8.

C. Cuantificación de arsénico en la capital de Guatemala

Una vez establecidos los valores del método, se procedió a cuantificar la concentración de arsénico en las distintas zonas de Guatemala.

Cuadro 10. Valores obtenidos para la cuantificación de arsénico en las distintas zonas de Guatemala

Zona	Concentración de arsénico (ppm)	Desviación estándar (ppm)
1	0.028 ± 0.003	0.002
2	0.030 ± 0.003	0.002
3	0.035 ± 0.003	0.003
5	0.032 ± 0.003	0.002
7	0.063 ± 0.003	0.003
8	0.024 ± 0.003	0.003
9	0.035 ± 0.003	0.002
10	0.025 ± 0.003	0.002
11	0.056 ± 0.003	0.002
12	0.026 ± 0.003	0.001
14	0.028 ± 0.003	0.002
15	0.033 ± 0.003	0.002
16	0.048 ± 0.003	0.002
Media muestral	0.036 ± 0.003	

Las zonas con mayor concentración de arsénico fueron zona 7, zona 11 y zona 16. La media muestral de este análisis fue de 0.036 ppm, con una desviación estándar de 0.0124 ppm.

D. Prueba de hipótesis

Para la primera hipótesis se realizó una prueba-t Student para comparar las medias muestrales del estudio realizado por Redmon, 2021 con el resultado obtenido en este trabajo, de esta manera, se pudo comparar este método con uno de mayor sensibilidad, exactitud y precisión, de manera que se pudiera determinar si el método azul de molibdeno es capaz de replicar los datos de arsénico o si se acerca al valor. Debido a que no se tenía la desviación estándar del método de Redmon et al, se calculó la desviación estándar por pesos como se observa en el Cálculo 9 (ver pág 46).

En este caso, se obtuvo una media muestral de 36 ppb con una desviación estándar de 12.4 ppb, mientras que el estudio mostró valores de 7.4 ppb y 4.404 ppb respectivamente. Utilizando estos valores se hizo una prueba t de Student para determinar si la diferencia de estas medias es significativa.

Cálculo 1. Prueba t de Student

$$t = \frac{(\bar{x}_2 - \bar{x}_1) - D_0}{\sqrt{\frac{s_1^2}{n_1} + \frac{s_2^2}{n_2}}} = \frac{(36 - 7.4)}{\sqrt{\frac{4.404^2}{20} + \frac{12.4^2}{13}}} = 7.99$$

Como se observa en el Cálculo 1, se obtuvo un valor de $t = 7.99$ con 14 grados de libertad, como se observa en el Cálculo 2 (ver página 45).

1. Prueba de hipótesis 1.

H_1 : El método azul de molibdeno es adecuado para cuantificar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala.

H_{1a} : El método azul de molibdeno no es adecuado para cuantificar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala.

Con $\alpha = 0.05$, puesto que el valor $t = 7.99$ es mayor al valor de $t_{crit} = 2.44$, no hay evidencia estadística para decir que las medias muestrales del estudio de Redmon et al, y este trabajo son similares, por lo que no se rechaza la hipótesis alternativa, y se determina que el método azul de molibdeno no es adecuado para cuantificar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala.

2. Prueba de hipótesis 2

H_2 : El método azul de molibdeno es adecuado para detectar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala.

H_{2a} : El método azul de molibdeno no es adecuado para detectar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala.

Según la estadística descriptiva (Cuadro 8) y el análisis de residuos (Figura 5), se puede concluir que el método de azul de molibdeno es capaz de detectar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala, ya que se encontró una correlación entre la absorbancia y la concentración de arsénico, además de los residuos, que no presentan un patrón y tienen una pendiente de 0.

VII. DISCUSIÓN

A. Tiempo de calentamiento

En el método de azul de molibdeno, en la parte de calentamiento, se busca oxidar el naranja de metilo y el arsénico para facilitar su reacción con el molibdato de amonio y formar el complejo azul esperado. En esta parte, el naranja de metilo se oxida a una forma de color rojo, que no se puede observar debido a su pequeña concentración y de la misma manera sucede con el arsénico. Debido a esto, la identificación del momento exacto para agregar el molibdato de amonio y el sulfato de hidracina es un problema para obtener la curva de calibración adecuada para medir las muestras.

Al realizar el procedimiento con distintos tiempos de calentamiento, se observó que mientras más aumenta el tiempo de calentamiento, mejor es el resultado del coeficiente de determinación (R^2) y se identificó que el mejor tiempo fue de tres horas y media (Cuadro 5). Sin embargo, al seguir aumentando el tiempo de calentamiento, se puede observar una disminución en la calidad de la curva de calibración. Esto se debe a que al pasar el punto de oxidación del naranja de metilo y el arsénico, el bromato de potasio (que sirve como oxidante) empieza a desestabilizar el arsénico, provocando una disminución en la formación del azul de molibdeno, por lo que se empieza a observar una coloración amarillo translúcido (Figura 6).

El tiempo de calentamiento puede variar dependiendo de varios factores, como el volumen o concentración que se haya utilizado. Como se observa en el Cuadro 6 las alícuotas con menor concentración y menor volumen tardaban menos en estabilizarse y llegar a la cantidad esperada de la curva de calibración seleccionada, y se mantenían estables por mayor cantidad de tiempo, por lo que para aquellos investigadores interesados en utilizar el método azul de molibdeno para cuantificar o detectar arsénico, se recomienda que realicen la prueba de calentamiento con distintos tiempo para asegurarse que se tenga el tiempo óptimo para todos los calibradores.

B. Evaluación del método

Una vez determinado el tiempo de calentamiento de las soluciones, se obtuvo la curva de calibración (Figura 4). Se puede observar que el calibrador 0.01 mg L^{-1} tiene un valor consistente de 0.000, lo que indica que no puede detectar arsénico en valores cercanos a esa cantidad, que es la establecida por la OMS, no obstante, el límite de detección fue de 0.007 (Cálculo 5).

Esto se puede deber a la concentración de arsénico que se colocó en el calibrador al inicio de la experimentación, que a pesar de que se utilizó una micropipeta de rango adecuado, es posible que debido a la pequeña cantidad de volumen utilizado ($51.77 \mu\text{L}$), no se haya logrado obtener la concentración deseada.

Para determinar que el método azul de molibdeno es capaz de cuantificar trazas de arsénico precisos y exactos, se compararon las medias muestrales entre el estudio de Redmon et al, 2021 y los resultados experimentales. Como se observa en la sección C. de resultados, no hay evidencia estadística para decir que ambas medias describen a la misma población. Esto puede deberse a tres razones. La primera consiste en que el arsénico en la capital de Guatemala haya aumentado significativamente en los últimos dos años, no obstante, no fue posible confirmar esta hipótesis por disponibilidad de equipo en el laboratorio. Para corroborar el valor real de la concentración de arsénico en el la capital, es necesario aplicar una metodología que logre medir trazas de hasta 0.1 ppb, de manera que se pueda comprobar con certeza la media poblacional y así determinar si la media muestral de este estudio la logra describir.

La segunda razón es que el equipo tiene una baja sensibilidad. Como se observa en los Cuadros 11 a 14, los valores obtenidos por el espectrómetro UV-Vis se medían hasta 3 decimales. Esto provocó que el espectro de mediciones no fuera lo suficientemente continuo para dar valores acertados. Ya que la ecuación de la recta tiene una pendiente tan baja, los decimales que se encuentran entre calibradores pueden afectar los resultados obtenidos, y debido a la incertidumbre de ± 0.0005 , los resultados podrían haber variado de tal manera que

se acercaran más al valor real. Para futuras pruebas, se recomienda utilizar un espectrómetro UV-Vis que tenga mayor sensibilidad y pueda ofrecer datos como mayor cantidad de cifras significativas.

La tercera razón consiste en la naturaleza de la espectrometría UV-Vis. El estudio de Redmon et al, hizo uso de la espectrometría ICP-MS, que tiene un límite de cuantificación de 0.001 ppm, que es mucho más bajo que el límite de cuantificación y detección obtenido con la metodología de azul de molibdeno. Además, el uso de ICP-MS evita la derivatización de las muestras, mientras que la metodología por espectrometría UV-Vis, por la necesidad de formar moléculas y complejos de color, se derivatizan las muestras y se obtiene una propagación de error mucho mayor de la esperada.

Por estas razones, se determinó que el método azul de molibdeno no es el adecuado para cuantificar arsénico a concentraciones bajas, sin embargo, todavía es capaz de cuantificar hasta cierto punto ya que como se observa en el Cuadro 8, existe una correlación entre la absorbancia y concentración, entonces es posible utilizarlo para pruebas baratas y hacer un análisis preliminar del agua a analizar. No obstante, si se desea obtener valores exactos de concentraciones bajas, se recomienda el uso de la espectroscopía ICP-MS.

Ahora bien, a pesar de no ser capaz de cuantificar a bajas concentraciones, se obtuvo un coeficiente de correlación $R = 0.9961$ que indica una relación entre la absorbancia y la concentración de arsénico en la curva de calibración como se observa en el Cuadro 8. Estadística de regresión para la curva de calibración de azul de molibdeno, además de un coeficiente de determinación de $R^2 = 0.9923$ que significa que el modelo explica el 99.23% de la variabilidad de la absorbancia. El error obtenido fue muy bajo y como se observa en la Figura 5 de análisis de residuales, la pendiente de los residuos es prácticamente 0, por lo que el modelo se ajusta bien a los datos obtenidos. Entonces, a pesar de que el método no pueda cuantificar valores tan bajos de arsénico, los puede detectar, por lo que el método es adecuado para detectar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala.

Ya que el valor obtenido para el límite de detección fue de 0.007 ppm, este método puede ser útil para realizar pruebas baratas de distintas muestras y en caso de que se detecte arsénico, tomar medidas correspondientes para el tratamiento de dicha agua, ya que el valor es cercano a 0.01 ppm que es el límite máximo permitido por la OMS, y un resultado positivo de esta prueba indicaría concentraciones peligrosas de arsénico en el agua de consumo.

Como se observa en el Cuadro 9, las concentraciones de arsénico fueron demasiado altas, el 100% de los datos está por encima de 0.01 ppm, sin embargo, debido a las razones explicadas anteriormente, a pesar de que no se pueda cuantificar con certeza, estos valores se pueden tomar como positivos en la detección de arsénico de Guatemala, y todas las muestras recolectadas están en valores cercanos a 0.01 ppm.

C. Análisis de los datos

Se detectó arsénico por todas las zonas medidas de la ciudad de Guatemala en concentraciones cercanas al límite máximo permitido de arsénico, especialmente en las zonas 7, 11 y 16. Las zonas 7 y 11 pertenecen a la misma área oeste. Zona 16, por otro lado, pertenece al área este, no obstante, se midió en el área cercana a zona 17. A pesar de que la totalidad de las zonas no obtienen su agua de los mismos proveedores, es posible que el agua de estas zonas esté contaminada con cantidades de arsénico por encima del límite permitido de 0.01 ppm lo que genera preocupación para la sociedad guatemalteca.

Los guatemaltecos han aumentado su uso de filtros a base de arcilla para reducir la contaminación de plástico y huella de carbono, sin embargo, varios de estos filtros comerciales no tienen la capacidad de eliminar el arsénico e incluso podrían contener más debido a la naturaleza del material, por lo que el consumo de arsénico en el agua puede ir aumentando. Se recomienda que las autoridades correspondientes realicen un análisis exhaustivo de las distintas fuentes de agua de la capital para tratar de reducir las concentraciones de arsénico, ya que ésta agua, aunque no sea necesariamente el agua para beber para varios guatemaltecos, sí se utiliza para uso diario, como lavar o cocinar, y ya que el arsénico se acumula dentro del cuerpo con la edad, es posible que se llegue a niveles alarmantes de arsénico en la población a largo plazo, poniendo en riesgo la

salud social y el crecimiento socioeconómico.

VIII. CONCLUSIONES

Una alternativa para los métodos de cuantificación de arsénico barata es el método azul de molibdeno. Este método consiste en formar un compuesto de molibdeno que se enlaza con el arsénico y tiene una coloración azul que es proporcional a la concentración del elemento. Para este método, se determinó que el mejor tiempo de calentamiento es de tres horas y media, que permite la oxidación completa del naranja de metilo y arsénico en las soluciones, pero mantiene la estabilidad de los compuestos.

El método evaluado presentó un límite de detección de 0.007 ppm y un límite de cuantificación de 0.025 ppm, sin embargo, al comparar la media muestral del estudio de Redmon et al, con el de esta investigación, se determinó que el método no es el adecuado para cuantificar trazas de arsénico en el agua de la capital de Guatemala a concentraciones bajas, pero es posible utilizar éste método como alternativa barata para el análisis preliminar del agua ya que fue posible la detección de arsénico en concentraciones cercanas al límite máximo permitido de arsénico de 0.01 ppm.

Este método puede servir como herramienta para las autoridades correspondientes al mantenimiento y control del agua, ya que no requiere de reactivos complejos y utiliza equipo barato. Es necesario tomar medidas para disminuir la concentración de arsénico en el agua de la capital de Guatemala, ya que esto puede generar problemas de salud para la población guatemalteca.

IX. RECOMENDACIONES

Para complementar este estudio, se recomienda utilizar un método validado y normalizado con límites de cuantificación de 0.01 ppm para poder correlacionar la media poblacional real de la concentración de arsénico en el agua de la capital de Guatemala, además de hacer uso de un espectrómetro UV-Vis que contenga más cifras significativas, de manera que los resultados sean continuos.

Al realizar el método azul de molibdeno, se recomienda realizar una prueba de calentamiento para el tiempo de oxidación del naranja de metilo y arsénico para la curva de calibración, ya que este valor puede variar según la concentración y volumen utilizado para los calibradores.

En el caso que se desee realizar un análisis más exhaustivo y con límites de detección y cuantificación más bajos, se recomienda hacer uso de espectroscopía ICP-MS.

Finalmente, se recomienda que las autoridades respectivas tomen medidas para disminuir la concentración de arsénico en el agua de consumo diario en la ciudad de Guatemala, ya que se detectaron valores cercanos al límite máximo recomendado por la OMS, para evitar problemas de salud para la población guatemalteca.

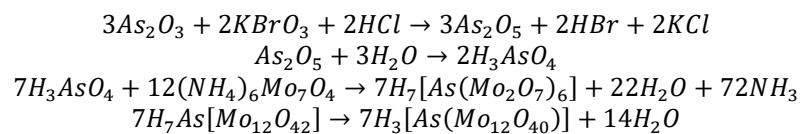
X. BIBLIOGRAFÍA

- Agencia para Sustancias Tóxicas el Registro de Enfermedades [ATSDR]. (2007). *Resumen de Salud Pública: Arsénico*. www.atsdr.cdc.gov/es/
- Agreda, O., Rojas, M., & Sarmiento, A. (2005). Evaluación diagnóstica del contenido de arsénico en las fuentes de abastecimiento de agua potable del Estado Carabobo, Venezuela. *Gaceta Médica de Caracas*, 113(1).
- Altamirano Guerrero, D. P. (2021). *Determinación de Arsénico en Residuos Mineros Depositados en la Relavera El Tablón, Portovelo, Mediante Espectrofotometría Visible y Método de Estándar de Adición* [Tesis de Ingeniería]. Universidad Central del Ecuador.
- Brammer, H., & Ravenscroft, P. (2009). Arsenic in groundwater: A threat to sustainable agriculture in South and South-east Asia. In *Environment International* (Vol. 35, Issue 3, pp. 647–654). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2008.10.004>
- Bundschuh, J., Pérez Carrera, A., & Litter, M. (2008). *IBEROARSEN Distribución del arsénico en las regiones Ibérica e Iberoamericana*. CYTED.
- Castro, M. L., Litter, M. I., Wong, M., & Mori, V. (2009). IBEROARSEN: Metodologías Analíticas para la Determinación y Especiación de Arsénico en Aguas y Suelos. In *IBEROARSEN: Metodologías Analíticas para la Determinación y Especiación de Arsénico en Aguas y Suelos* (pp. 43–64). CYTES.
- Cotton, F. A., Wilkinson, G., Murillo, C. A., & Bochmann, M. (1999). *Advanced Inorganic Chemistry* (Sexta edición). John Wiley & Sons.
- De la Rosa, P. M. (2018). “*Toxicología forense estudia los métodos de investigación médico-legal en los casos de envenenamiento y muerte.*”
- Fernández Roca, D. I. (2008). *La Prevención y Control de la Contaminación del Recurso Hídrico en Guatemala, Necesidad de una Reglamentación Efectiva* [Tesis de Licenciatura]. Universidad del Valle de Guatemala.
- Fundación para la Conservación de la Región Metropolitana de Guatemala [FUNCAGUA]. (2022). *Informe del estado del Agua de la Región Metropolitana de Guatemala 2022: el agua nos une* (2022nd ed.). <https://funcagua.org.gt>
- García, S. I. (2011). *Hidroarsenicismo Crónico Regional Endémico HACRE: Módulo de Capacitación*. Ministerio de Salud de la Nación.
- Reglamento de las descargas y reuso de aguas residuales y de la disposición de lodos, (2006).
- Gürkan, R., Kir, U., & Altunay, N. (2015). Development of a simple, sensitive and inexpensive ion-pairing cloud point extraction approach for the determination of trace inorganic arsenic species in spring water, beverage and rice samples by UV-Vis spectrophotometry. *Food Chemistry*, 180, 32–41. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.01.142>
- Instituto Ecuatoriano de Normalización [INEN]. (2012). *Estaño. Lingotes. Determinación del Contenido de Antimonio y Arsénico*.
- Leonel, M., Santisteban, C., & Peña, W. (2015). Evaluación de la calidad del agua superficial con potencial para consumo humano en la cuenca alta del Sis Iacán, Guatemala. In *Junio* (Vol. 7, Issue 1).
- Litter, M. I., & Morgada, M. E. (2009). IBEROARSEN: Metodologías analíticas para la determinación y especiación de arsénico en aguas y suelos. In *IBEROARSEN: Metodologías analíticas para la determinación y especiación de arsénico en aguas y suelos* (pp. 19–27). CYTES.
- Mandal, B. K., & Suzuki, K. T. (2002). Arsenic round the world: A review. In *Talanta* (Vol. 58, Issue 1). [https://doi.org/10.1016/S0039-9140\(02\)00268-0](https://doi.org/10.1016/S0039-9140(02)00268-0)
- Marta, D., & Litter, I. (n.d.). *The problem of arsenic in Argentina: HACRE*.
- Mercado, B. M. (2013). *Remoción de Boro y Arsénico Presentes en Altas Concentraciones en Agua Mediante Escorias Metalúrgicas* [Doctor en Ingeniería]. Universidad Nacional Autónoma de México.
- para Sustancias Tóxicas el Registro de Enfermedades, A. (n.d.). *ATSDR - Resumen de Salud Pública: Arsénico*. www.atsdr.cdc.gov/es/

- Ramírez, A. V. (2013). Exposición ocupacional y ambiental al arsénico. Actualización bibliográfica para investigación científica. *An Fac Med.*, 74(3), 237–247.
- Redmon, J. H., Mulhern, R. E., Castellanos, E., Wood, E., McWilliams, A., Herrera, I., Liyanapatirana, C., Weber, F., Levine, K., Thorp, E., Bynum, N., Amato, K., Acevedo, M. A. N., Baker, J., Van Houtven, G., Henry, C., Wade, C., & Kondash, A. J. (2022). A Participatory Science Approach to Evaluating Factors Associated with the Occurrence of Metals and PFAS in Guatemala City Tap Water. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 19(10). <https://doi.org/10.3390/ijerph19106004>
- Santos Fiestas, M., & Millones Ñiquen, A. L. (2019). *Influencia de la concentración y el tiempo de contacto del carbón activado de cáscara de coco en la remoción de arsénico de aguas subterráneas de Mórrope* [Tesis de Ingeniería Química]. Universidad Nacional “Pedro Ruiz Gallo.”
- Silva, J. C. J., & Ciminelli, V. S. T. (2009). *IBEROARSEN: Metodologías Analíticas para la Determinación y Especiación de Arsénico en Aguas y Suelos* (pp. 29–41). CYTES.
- Skoog, D. A., West, D. M., Holler, J., & Crouch, S. R. (2015). *Fundamentos de química analítica* (Novena edición). Cengage Learning.

XI. ANEXOS

Reacción 1. Reacción del método azul de molibdeno



Esta es una propuesta para todas las reacciones que suceden adentro del método azul de molibdeno, ya que no se encontró la reacción exacta.



Figura 6. Coloración amarilla para la prueba de calentamiento $t = 4$ horas



Figura 7. Curva de calibración obtenida

Cuadro 11. Valores obtenidos para la concentración de arsénico de las zonas 1, 2 y 3

Absorbancia zona 1	Concentración (ppm)	Absorbancia zona 2	Concentración (ppm)	Absorbancia zona 3	Concentración (ppm)
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031
0.004	0.031	0.004	0.031	0.004	0.031
0.003	0.026	0.004	0.031	0.006	0.041
0.004	0.031	0.003	0.026	0.004	0.031
0.004	0.031	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.004	0.031	0.004	0.031	0.004	0.031
0.004	0.031	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.004	0.031	0.003	0.026	0.005	0.036
0.004	0.031	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.004	0.031	0.004	0.031
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.004	0.031	0.004	0.031	0.005	0.036
0.004	0.031	0.004	0.031	0.004	0.031
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.004	0.031	0.004	0.031	0.004	0.031
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036
0.004	0.031	0.003	0.026	0.005	0.036
0.004	0.031	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036
0.003	0.026	0.004	0.031	0.004	0.031
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036

Cuadro 12. Valores obtenidos para la concentración de arsénico en las zonas 5, 7 y 8

Absorbancias zona 5	Concentración (ppm)	Absorbancias zona 7	Concentración (ppm)	Absorbancias zona 8	Concentración (ppm)
0.005	0.036	0.011	0.066	0.003	0.026
0.005	0.036	0.011	0.066	0.002	0.021
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.004	0.031	0.011	0.066	0.003	0.026
0.004	0.031	0.010	0.061	0.003	0.026
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.004	0.031	0.010	0.061	0.003	0.026
0.004	0.031	0.010	0.061	0.004	0.031
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.005	0.036	0.011	0.066	0.002	0.021
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.004	0.031	0.011	0.066	0.002	0.021
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.005	0.036	0.011	0.066	0.004	0.031
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.004	0.031	0.011	0.066	0.003	0.026
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.004	0.031	0.011	0.066	0.002	0.021
0.004	0.031	0.011	0.066	0.003	0.026
0.004	0.031	0.011	0.066	0.002	0.021
0.004	0.031	0.010	0.061	0.003	0.026
0.005	0.036	0.011	0.066	0.003	0.026
0.004	0.031	0.011	0.066	0.002	0.021
0.004	0.031	0.011	0.066	0.003	0.026
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.004	0.031	0.010	0.061	0.002	0.021
0.005	0.036	0.010	0.061	0.003	0.026
0.004	0.031	0.011	0.066	0.003	0.026
0.004	0.031	0.011	0.066	0.002	0.021

La propagación de error para la absorbancia es de ± 0.0005 , y para la concentración es ± 0.003 ppm.

Cuadro 13. Valores obtenidos para la concentración de arsénico en las zonas 9, 10 y 11

Absorbancia zona 9	Concentración (ppm)	Absorbancia zona 10	Concentración (ppm)	Absorbancia zona 11	Concentración (ppm)
0.005	0.036	0.003	0.026	0.008	0.051
0.005	0.036	0.002	0.021	0.009	0.056
0.004	0.031	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.008	0.051
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.008	0.051
0.005	0.036	0.003	0.026	0.010	0.061
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.004	0.031	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.004	0.031	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.002	0.021	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.004	0.031	0.002	0.021	0.009	0.056
0.004	0.031	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.002	0.021	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.002	0.021	0.009	0.056
0.004	0.031	0.002	0.021	0.009	0.056
0.004	0.031	0.002	0.021	0.009	0.056
0.005	0.036	0.002	0.021	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.002	0.021	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.005	0.036	0.003	0.026	0.009	0.056
0.004	0.031	0.002	0.021	0.009	0.056

La propagación de error para la absorbancia es de ± 0.0005 , y para la concentración es ± 0.003 ppm.

Cuadro 14. Valores obtenidos para la concentración de arsénico en las zonas 12, 14, 15 y 16

Absorbancia zona 12	Concentración (ppm)	Absorbancia zona 14	Concentración (ppm)	Absorbancia zona 15	Concentración (ppm)	Absorbancia zona 16	Concentración (ppm)
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036	0.007	0.046
0.002	0.021	0.004	0.031	0.004	0.031	0.007	0.046
0.003	0.026	0.004	0.031	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036	0.007	0.046
0.003	0.026	0.004	0.031	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.004	0.031	0.004	0.031	0.007	0.046
0.002	0.021	0.004	0.031	0.005	0.036	0.008	0.051
0.003	0.026	0.004	0.031	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.004	0.031	0.004	0.031	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036	0.008	0.051
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036	0.008	0.051
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036	0.007	0.046
0.003	0.026	0.004	0.031	0.004	0.031	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.008	0.051
0.003	0.026	0.003	0.026	0.005	0.036	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.007	0.046
0.003	0.026	0.003	0.026	0.004	0.031	0.007	0.046
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036	0.008	0.051
0.003	0.026	0.004	0.031	0.005	0.036	0.007	0.046

La propagación de error para la absorbancia es de ± 0.0005 , y para la concentración es ± 0.003 ppm.

Cálculo 2. Grados de libertad

$$GL = \frac{\left(\frac{S_1^2}{n_1}\right)^2 + \left(\frac{S_2^2}{n_2}\right)^2}{\frac{1}{n_1 - 1} \left(\frac{S_1^2}{n_1}\right)^2 + \frac{1}{n_2 - 1} \left(\frac{S_2^2}{n_2}\right)^2} = \frac{\left(\frac{4.404^2}{20}\right)^2 + \left(\frac{12.4^2}{13}\right)^2}{\frac{1}{20 - 1} \left(\frac{4.404^2}{20}\right)^2 + \frac{1}{13 - 1} \left(\frac{12.4^2}{13}\right)^2} = 14 \text{ GL}$$

Donde S_1 es la desviación estándar del estudio de Redmon et al, n_1 es el número de zonas analizadas en ese mismo estudio, S_2 es la desviación estándar del trabajo realizado en este documento y n_2 es el número de zonas analizadas en este trabajo.

Cálculo 3. Sensibilidad analítica

$$S.A. = \frac{m}{DEG} = \frac{0.2019 \frac{1}{ppm}}{3.85 \times 10^{-4} ppm} = 524.55$$

Donde m es la pendiente de la ecuación de regresión lineal de la curva de calibración, y DEG es la desviación estándar general obtenida del promedio de la desviación estándar de los calibradores.

Cálculo 4. Señal mínima de detección

$$S_m = S_{bl} + (3)(s_{bl}) = -0.0006 \text{ ppm} + 3(0.0004983 \text{ ppm}) = 0.001 \text{ ppm}$$

Donde S_m es la señal mínima de detección, S_{bl} es la señal promedio obtenida del blanco y s_{bl} es la desviación estándar del blanco.

Cálculo 5. Límite de detección

$$LOD = \frac{(S_m - S_{bl})}{m} = \frac{(0.001 \text{ ppm} - (-0.0006 \text{ ppm}))}{0.2019 \frac{1}{ppm}} = 0.025 \text{ ppm}$$

Donde LOD es el límite de detección, S_m es la señal mínima de detección y S_{bl} es la señal promedio obtenida del blanco.

Cálculo 6. Señal de cuantificación

$$S_q = S_{bl} + 10(s_{bl}) = -0.0006 \text{ ppm} + 10(0.0004983 \text{ ppm}) = 0.004 \text{ ppm}$$

Donde S_q es la señal de cuantificación, S_{bl} es la señal promedio obtenida del blanco y s_{bl} es la desviación estándar del blanco.

Cálculo 7. Límite de cuantificación

$$LOQ = \frac{S_q - S_{bl}}{m} = \frac{0.004 \text{ ppm} - (-0.0006 \text{ ppm})}{0.2019 \frac{1}{ppm}} = 0.025 \text{ ppm}$$

Donde LOQ es el límite de cuantificación, S_m es la señal mínima de detección y S_{bl} es la señal promedio obtenida del blanco.

Cálculo 8. Rango dinámico

$$RD = \text{Calibrador más alto} - LOQ = 0.1ppm - 0.025ppm = 0.075ppm$$

Donde RD es el rango dinámico y LOQ es el límite de cuantificación.

Cálculo 9. Desviación estándar por pesos de una población finita de muestra desconocida

$$\begin{aligned}\sigma &= \sqrt{\frac{\sum n_i(x_i - \mu)^2}{\frac{n-1}{n} \cdot N}} \\ &= \sqrt{\frac{13(9.6 - 7.4)^2 + 4(10.2 - 7.4)^2 + 29(2.4 - 7.4)^2 + 15(0.5 - 7.4)^2 + 25(7.6 - 7.4)^2 + 2(10.5 - 7.4)^2}{\frac{6-1}{6} \cdot 108}} \\ &= 4.404\end{aligned}$$

Donde n_i es el número de datos en el peso p_i , x_i es la media del peso p_i , μ es la media muestral, n es el número de pesos y N es el número de datos totales y σ es la desviación estándar de la población.

Cálculo 10. Determinación de número de zonas representativas de la capital de Guatemala

$$n = \frac{N * Z_{\frac{\alpha}{2}}^2 * \sigma^2}{\varepsilon^2(N-1) + Z_{\frac{\alpha}{2}}^2 * \sigma^2} = \frac{22 * 1.9599^2 * 4.404^2}{1.5^2(22-1) + 1.9599^2 * 4.404^2} \approx 13$$

Donde n es el número de zonas representativas de la capital de Guatemala, α se tomó como 0.05. σ es la desviación estándar de la población y ε es el error permitido en el análisis que en este caso se tomó como 1.5 por conveniencia.

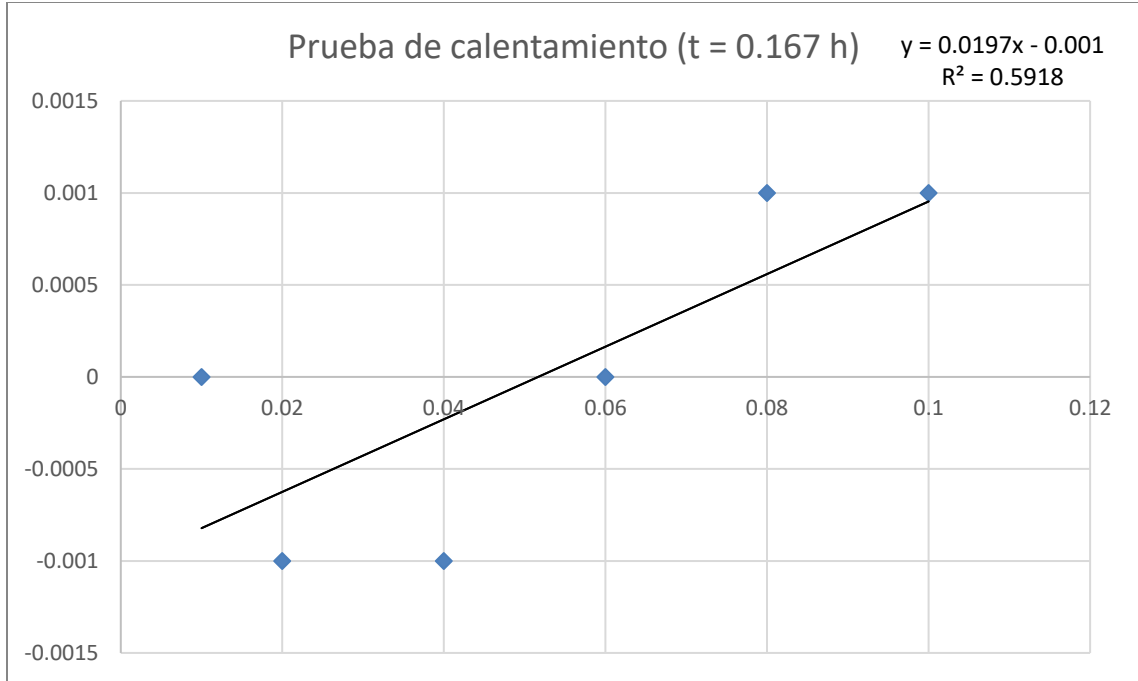


Figura 8. Curva de calibración para t = 0.167 h

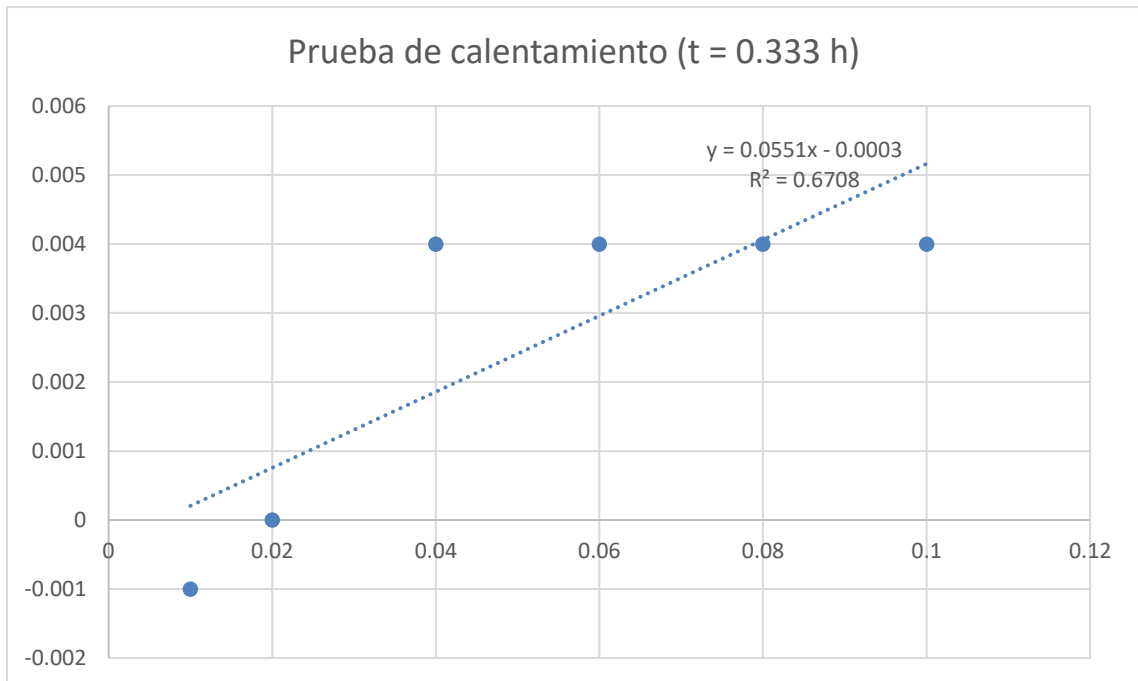


Figura 9. Curva de calibración para t = 0.333 h

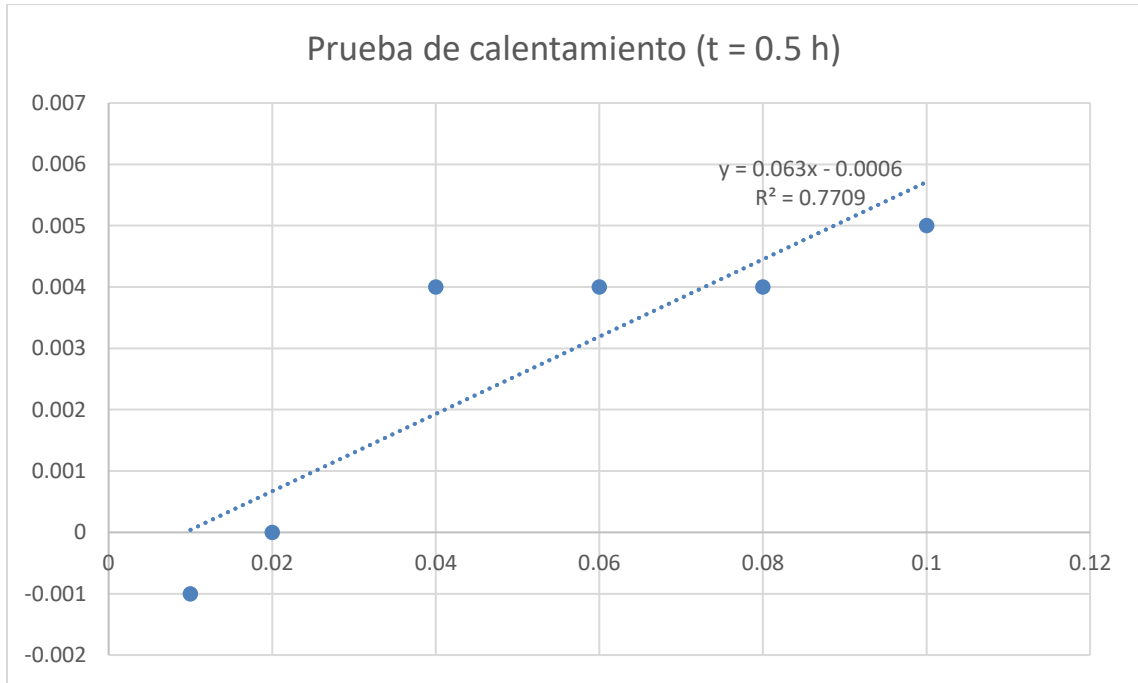


Figura 10. Curva de calibración para t = 0.5 h

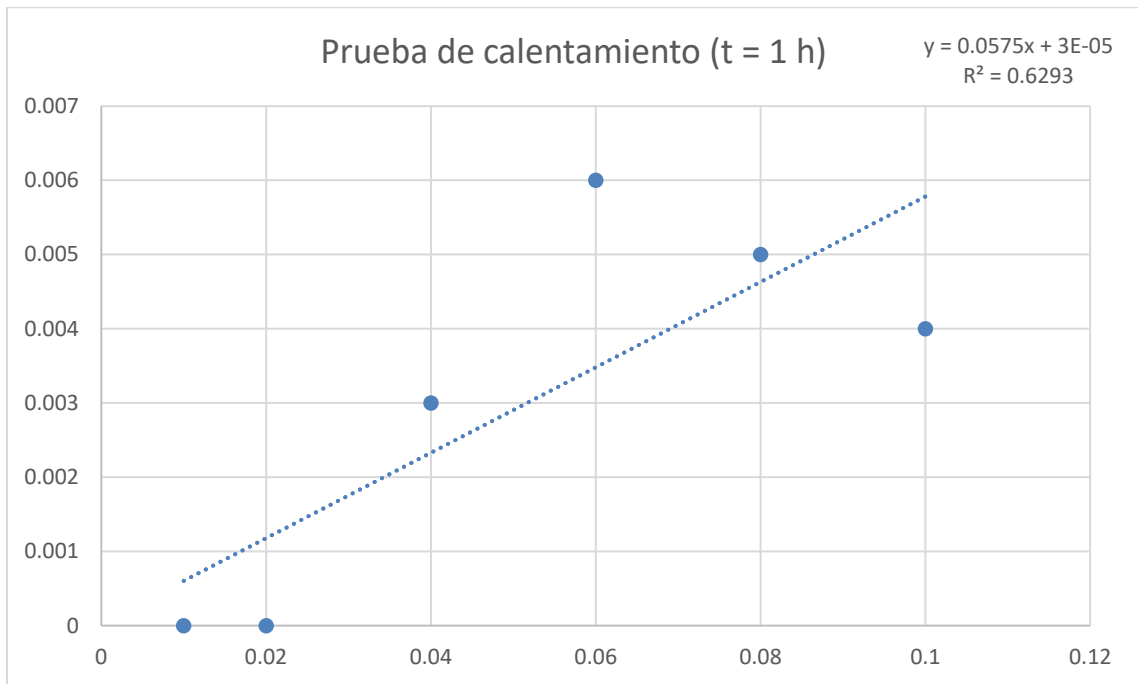


Figura 11. Curva de calibración para t = 1 h

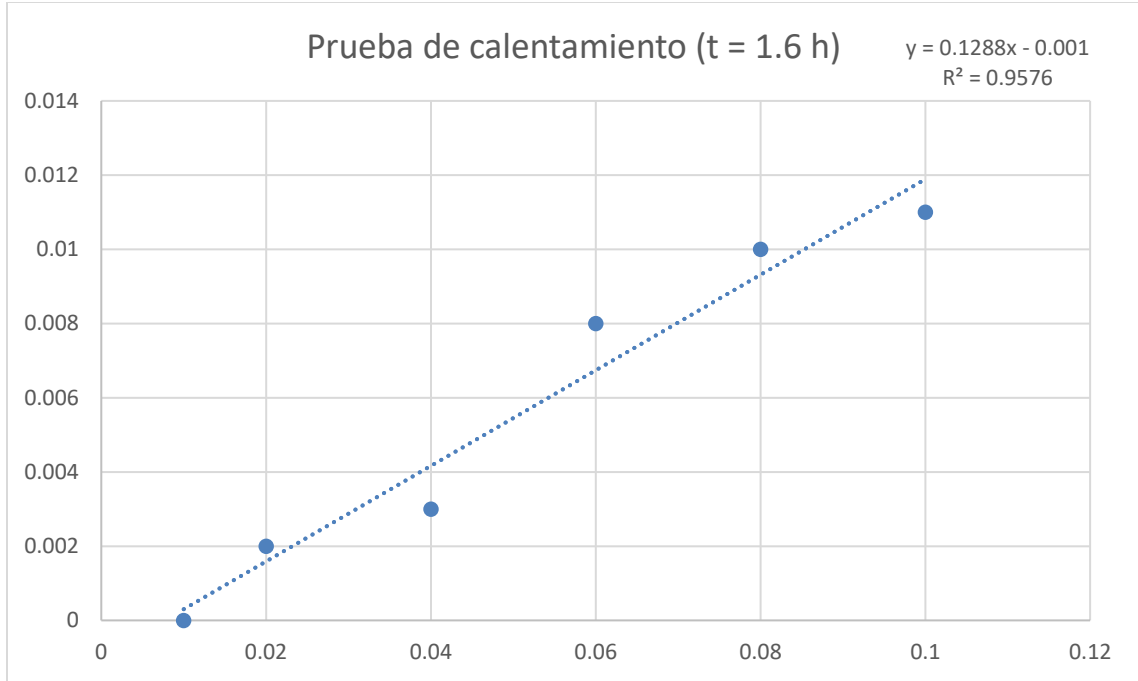


Figura 12. Curva de calibración para t = 1.6 h

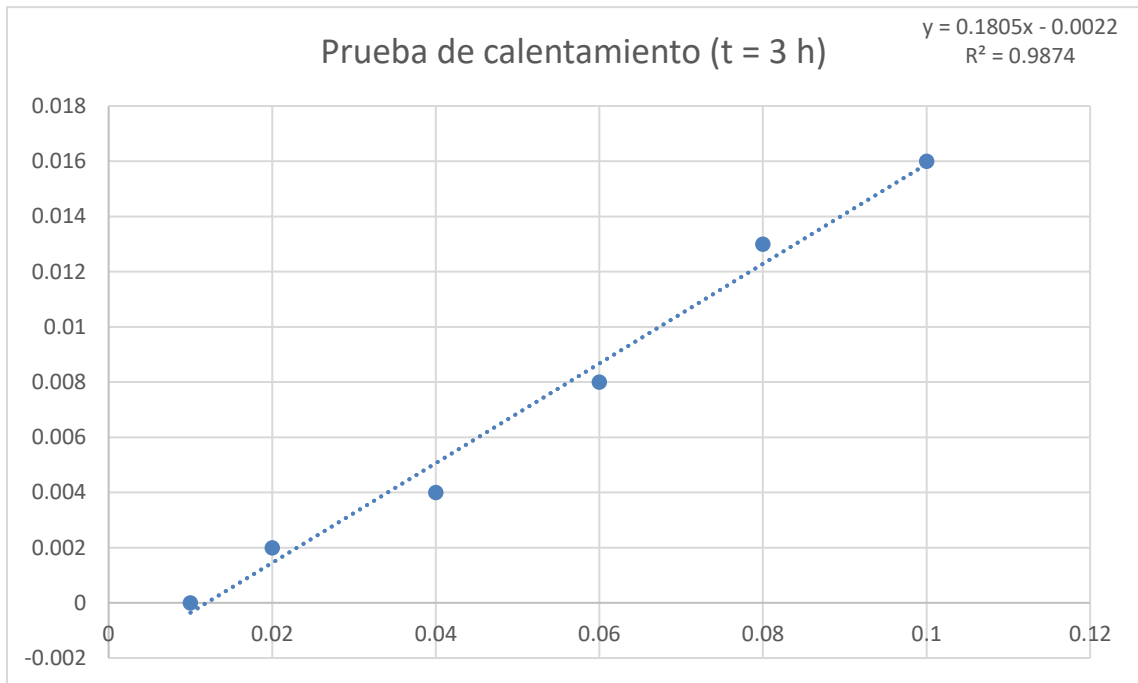


Figura 13. Curva de calibración para t = 3 h

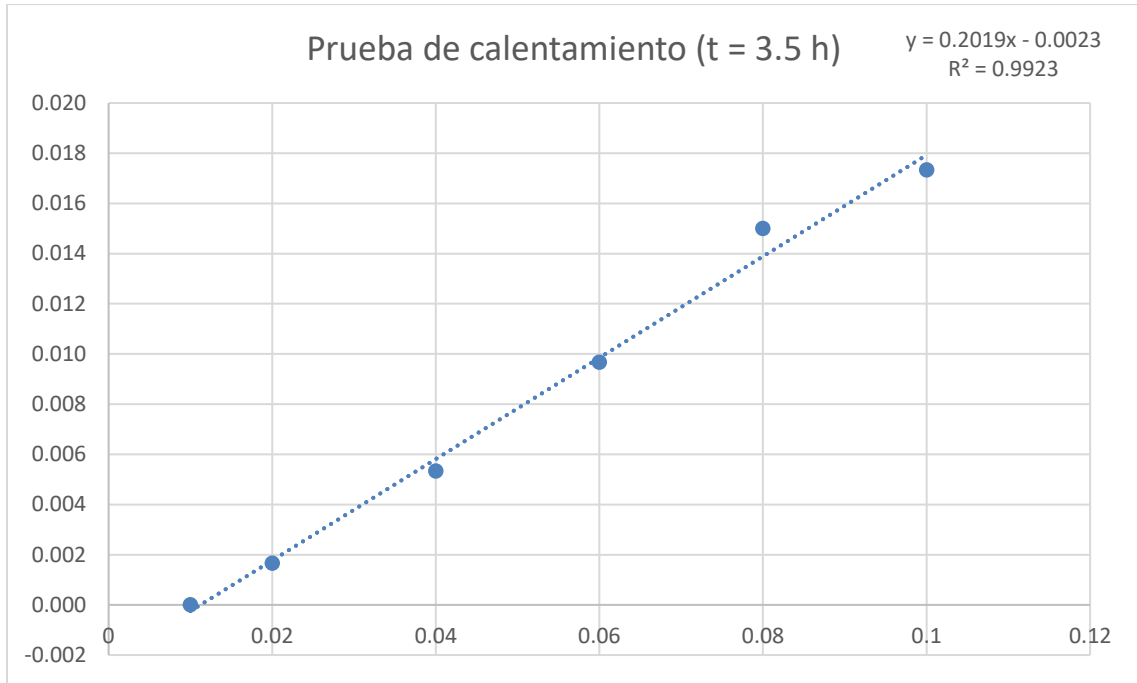


Figura 14. Curva de calibración para t = 3.5 h

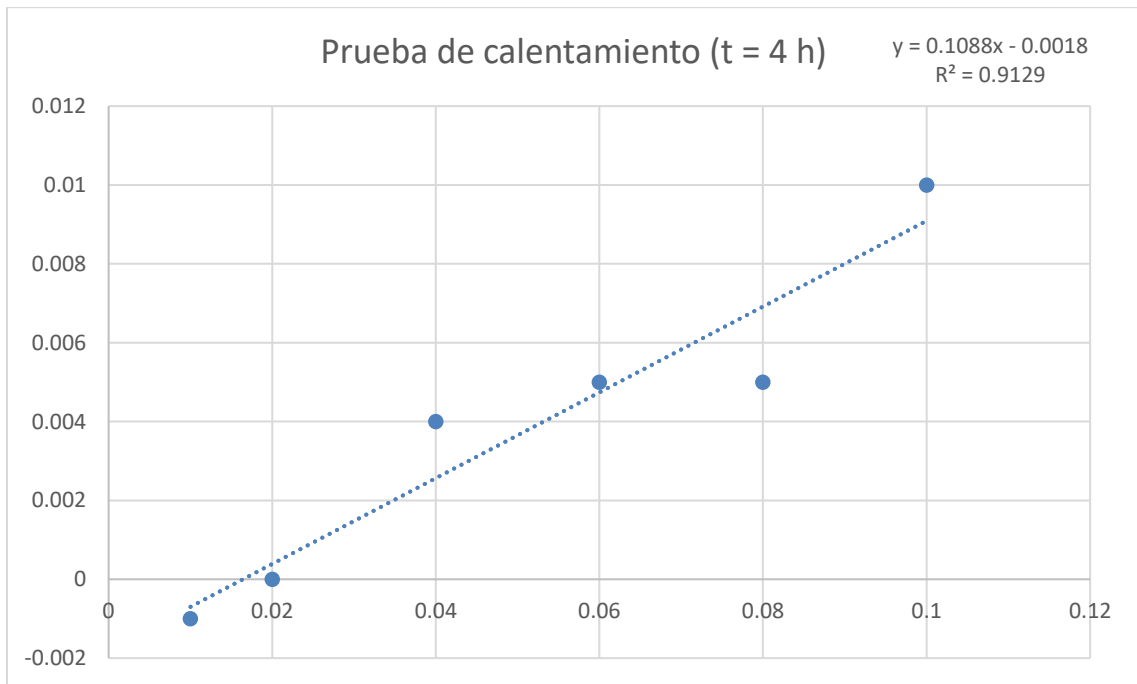


Figura 15. Curva de calibración para t = 4