

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ciencias y Humanidades



**Fabricación y Evaluación de Desempeño de un Prototipo de
Espectroscopio Raman Elaborado con Materiales de Bajo Costo**

Trabajo de graduación en modalidad de Tesis presentado por

Pablo Daniel Papa Loaiza

para optar al grado académico de Licenciado en Química

Guatemala,

2023

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ciencias y Humanidades



**Fabricación y Evaluación de Desempeño de un Prototipo de
Espectroscopio Raman Elaborado con Materiales de Bajo
Costo**

Trabajo de graduación en modalidad de Tesis presentado por

Pablo Daniel Papa Loaiza

para optar al grado académico de Licenciado en Química

Guatemala,

2023

Vo. Bo. :

(f) 
Lic. Ana Luisa Mendizábal

Tribunal Examinador:

(f) 
Lic. Ana Luisa Mendizábal

(f) 
Lic. Angelika Rebecca Hasselmann

(f) 
MA. Irma Patricia Orellana

Fecha de aprobación: Guatemala, 1 de diciembre de 2023

PREFACIO

El presente trabajo lleva un agradecimiento especial a mis padres y hermana, quienes me han traído hasta este punto y me han brindado su apoyo durante toda mi vida.

A Ana Luisa Mendizábal, por su ayuda y asesoría durante todas las fases de este proyecto.

A Irma Orellana, por su apoyo y seguimiento del proceso del trabajo.

A mis catedráticos y otros colaboradores de la Universidad del Valle de Guatemala por sus enseñanzas, en especial a Angelika Hasselmann, Ángel Ramírez y Estuardo Mancio, quienes estuvieron dispuestos a brindarme su tiempo y conocimientos para este proyecto.

A mis colegas universitarios, por compartir sus ideas y experiencias conmigo, especialmente a Ángel Higueros, por aportar directamente a la parte experimental de este trabajo.

ÍNDICE

Lista de figuras.....	vi
Lista de cuadros.....	vii
Resumen	viii
I. Introducción	1
II. Objetivos.....	2
III. Justificación.....	3
IV. Marco teórico	4
A. Espectroscopía	4
B. Espectroscopía Raman	6
A. Contexto histórico	6
B. Aplicaciones	6
C. Funcionamiento	7
C. Diseño del sistema	8
A. Fuente de luz	9
B. Filtro óptico	9
C. Divisor de haz	10
D. Espectrómetro	10
D. Parámetros de los equipos de espectroscopía	12
V. Metodología.....	14
A. Sitio de estudio.....	14
B. Objetos de estudio.....	14
C. Diseño, enfoque y tipo de investigación	14
D. Tipo de muestra	14
E. Criterios de inclusión y exclusión	14
F. Variables (conceptualización y operacionalización).....	15
G. Hipótesis	15
H. Instrumentos de medición	15
I. Procedimiento	16
VI. Resultados y discusión	21
A. Determinación de la exactitud del equipo.....	21

B. Determinación de la resolución del equipo.....	26
C. Determinación de la asequibilidad del equipo.....	28
VII. Conclusiones	30
VIII. Recomendaciones	31
IX. Referencias bibliográficas	34
X. Anexos	37

LISTA DE FIGURAS

Figura #1: Espectro completo de la radiación electromagnética	4
Figura #2: Diagrama de niveles de energía de dispersión Ryaleigh, Stokes, y Antistokes	7
Figura #3: Diagrama del sistema para espectroscopía Raman	8
Figura #4: Esquema de funcionamiento de filtros ópticos	9
Figura #5: Diagrama de detector CCD	12
Figura #6: Esquema de un equipo de espectroscopía Raman simplificado	16
Figura #7: Esquema utilizado para la fabricación del prototipo 1	18
Figura #8: Esquema utilizado para la fabricación del prototipo 2	19
Figura #9: Imagen de un espectro Raman de acetona obtenido experimentalmente con el prototipo 2.1 en el software Spectragryph	22
Figura #10: Imagen de un espectro Raman de peróxido de hidrógeno obtenido experimentalmente con el prototipo 2.1	22
Figura #11: Imagen de un espectro Raman teórico de acetona en el software Spectragryph	23
Figura #12: Imagen de un espectro Raman de acetona obtenido experimentalmente con el prototipo 2.2 en el software Spectragryph	24
Figura #13: Interpolación de imágenes de señales láser de 532nm y 780nm obtenidas con el prototipo 2	26
Figura #14: Imagen de un espectro Raman sin muestra generada por el prototipo 2	38
Figura #15: Imagen de un espectro Raman de acetona obtenido experimentalmente con el prototipo 2	38
Figura #16: Imagen de un espectro Raman de peróxido de hidrógeno obtenido experimentalmente con el prototipo 2	38
Figura #17: Prototipo 1	39
Figura #18: Prototipo 2 con una muestra de peróxido de hidrógeno	39
Figura #19: Prototipo 2.2 con una muestra de acetona	40
Figura #20: Estructura interna de una unidad de recolección óptica	40

LISTA DE CUADROS Y GRÁFICAS

Cuadro #1: Variables a evaluar	15
Cálculo #1: Obtención del ángulo de incidencia	17
Gráfica #1: Comparación entre un espectro Raman de acetona teórico y uno experimental obtenido con el prototipo 2.1	23
Gráfica #2: Comparación entre un espectro Raman de acetona teórico y uno experimental obtenido con el prototipo 2.2	24
Cálculo #2: Obtención de la resolución del equipo	26
Gráfica #3: Espectro teórico utilizado para evaluar la resolución del equipo	27
Cuadro #2: Comparación de precios entre modelos de espectroscopía Raman	28
Cuadro #3: Presupuesto de partes utilizadas para prototipo 2	37
Cuadro #4: Presupuesto para un prototipo sin omitir partes no esenciales	37

RESUMEN

La técnica de espectroscopía Raman es un método de análisis químico relativamente nuevo en Guatemala que puede ser utilizada para identificar una gran variedad de compuestos y mezclas de manera no destructiva. Consiste en bombardear la muestra con radiación emitida por un láser y observar el espectro generado por los modos de baja frecuencia, los cuales dispersan la luz en diferentes longitudes de onda. La información que proporciona es complementaria a la que brinda un espectro infrarrojo.

Actualmente, la espectroscopía Raman no es muy conocida alrededor de Guatemala, por lo que es poco común encontrar instrumentos de este tipo en instituciones aún cuando podrían ser de utilidad en ellas. Por este motivo, se planteó la posibilidad de fabricar un espectroscopio Raman de bajo costo utilizando componentes no convencionales, esperando que la existencia de un modelo asequible incite a instituciones educativas y participantes de estudios independientes a fomentar el uso de esta técnica. Para poner a prueba el equipo construido, se buscó determinar su exactitud, resolución y asequibilidad.

Para dichas pruebas, se emplearon muestras de acetona al 99.4% y peróxido de hidrógeno al 33%. El prototipo final demostró ser ineficaz a la hora de medir muestras, por lo que no se pudo obtener un dato concreto acerca de su exactitud. Se determinó que la resolución del instrumento fue de 35.9 cm^{-1} , lo que es suficiente para la medición de la mayoría de compuestos, pero considerablemente inferior a la de un modelo comercial promedio. Por último, al evaluar el presupuesto utilizado, se determinó que el precio del equipo aproxima a los Q2,000.00. Al comparar esto con el precio mínimo de un instrumento comercial de gama baja (Q78,000) y al costo promedio de los materiales utilizados para ensamblar un prototipo de código abierto (Q17,500), el prototipo elaborado equivale a un 2.57% y a un 11.43% del precio respectivamente. Las pruebas llevan a la conclusión de que, aunque se logró reducir los costos considerablemente, el espectroscopio fabricado no puede ser considerado un modelo funcional. Esto se debe en gran medida al detector utilizado y a la falta de precisión durante el proceso de fabricación calibración. Se recomienda evaluar componentes alternos para definir la mejor relación desempeño - costo.

I. INTRODUCCIÓN

La espectroscopía Raman es una técnica con varias aplicaciones dentro del análisis químico. Consiste en estudiar los modos de baja frecuencia basándose en la dispersión inelástica. El tipo de espectroscopio generalmente utilizado para dicho análisis consiste en una serie de láseres que interactúan con modos vibracionales de baja frecuencia, los cuales generan un cambio en la longitud de onda, que luego es detectado por el sistema. Es posible utilizar fuentes de energía y detectores alternos para crear un sistema simple que detecte la dispersión Raman (Belmonte, 2001).

Debido al elevado precio comercial de los equipos de espectroscopía Raman (de entre 10, 000 y 30, 000 dólares americanos), existen instituciones de varios tipos en el país que no cuentan con los recursos suficientes para hacer uso de ellos de manera conveniente (StellarNet, 2022).

Se han documentado distintos prototipos de espectroscopios Raman construidos utilizando materiales que pueden ser conseguidos por un precio significativamente menor al de un modelo comercial. Dichos prototipos suelen presentar una resolución relativamente baja; sin embargo, la mayor parte de estudios realizados en laboratorios farmacéuticos y proyectos independientes no requieren parámetros particularmente elevados para presentar resultados válidos. Estudios como los de Williamson (2016), Strong (1968), y Barnett (2007) probaron ser efectivos en una variedad de pruebas analíticas.

En este estudio se busca la fabricación y validación de un equipo de espectroscopía Raman a un precio relativamente bajo. Las piezas y materiales necesarios serán adquiridos de manera comercial o fabricados utilizando las instalaciones de la Universidad del Valle de Guatemala, y se realizarán distintas pruebas para evaluar el desempeño del prototipo final. Se espera obtener como resultado la eficacia y costo del equipo elaborado en comparación al profesional, junto con el tipo de análisis que puede ser realizado de manera correcta con el equipo construido.

II. OBJETIVOS

A. Objetivo general

Evaluar la resolución, exactitud y asequibilidad de un equipo de espectroscopía Raman construido con materiales de bajo precio y compararlas con datos teóricos de un equipo comercial.

B. Objetivos específicos

- Fabricar un equipo de espectroscopía Raman de bajo costo.
- Realizar el análisis necesario para la evaluación de parámetros de un equipo de espectroscopía.
- Obtener datos de la eficacia del espectro obtenido con el equipo de bajo costo.

III. JUSTIFICACIÓN

Las variadas técnicas de espectroscopía son una herramienta utilizada en todo tipo de análisis químicos. Un ejemplo importante en Guatemala es la identificación de polimorfos en productos farmacéuticos; esto se realiza con el fin de conocer la efectividad de los fármacos. La herramienta más utilizada para este proceso es la espectroscopía Raman, debido a su precisión y versatilidad (Varetti, 2009). Los equipos utilizados para llevar estos estudios a cabo varían en gran medida en cuanto a calidad y precio, se estima que el precio de un espectroscopio Raman comercial oscila entre los 10, 000 y 60, 000 dólares americanos (StellarNet, 2022), lo que los hace poco accesibles para laboratorios pequeños y estudios independientes.

Este documento se realizó con el fin de evaluar el desempeño de un equipo espectroscópico para dar a conocer la viabilidad de maquinaria no profesional en distintos tipos de análisis y de desarrollar una alternativa a métodos de análisis que requieren de varios equipos de medición para obtener un resultado. Al ser un prototipo inicial, se debe tomar en cuenta que no se espera obtener un desempeño a la altura del de un equipo comercial, pero el modelo puede ser utilizado como guía para obtener la mejor relación desempeño-costos.

Actualmente, la técnica de espectroscopía Raman no es muy conocida alrededor del país, y no se muestra interés por parte de las empresas y laboratorios en implementar este tipo de equipo en sus instalaciones. Sin embargo, este método es una herramienta analítica muy útil para una amplia variedad de aplicaciones, por lo que puede ser muy conveniente contar con ellos. El proyecto podría brindar a instituciones educativas una oportunidad para proveer una explicación más concreta acerca de este tipo de instrumento al contar con un modelo funcional. Además de esto, la existencia de un espectroscopio Raman con un precio reducido abre la posibilidad para distintos laboratorios de contar con esta tecnología, lo cual podría mejorar la producción de fármacos y optimizar procesos de análisis forense.

IV. MARCO TEÓRICO

A. Espectroscopía

La espectroscopía es una técnica de análisis que estudia la interacción entre la materia y la radiación electromagnética. Posee una gran variedad de aplicaciones en distintas ramas de la química, biología, física, astronomía, y otras ciencias, y es una técnica esencial en el análisis de muestras e identificación de compuestos. La información proporcionada por la espectroscopía se estudia mediante el análisis espectral, el cual consiste en la detección de absorción o emisión de radiación por parte de una muestra a una determinada longitud de onda con relación a los niveles de energía del compuesto al inducir una transición cuántica en él (Harris, 1990).

Los primeros experimentos realizados en torno a la espectroscopía fueron llevados a cabo entre 1666 y 1672 por el físico Isaac Newton. En estos, se descubrió que la luz blanca puede descomponerse en un espectro de colores al pasar a través de un prisma, y recomponerse al pasar por otro. Se podría decir que el primer espectroscopio fue elaborado en 1802 por el inglés William Wollaston, este consistió en una rendija a través de la cual la luz entraba hacia un lente seguido por un prisma. La luz emergente dispersa podía ser examinada por medio de un telescopio (Hunt, 2011).

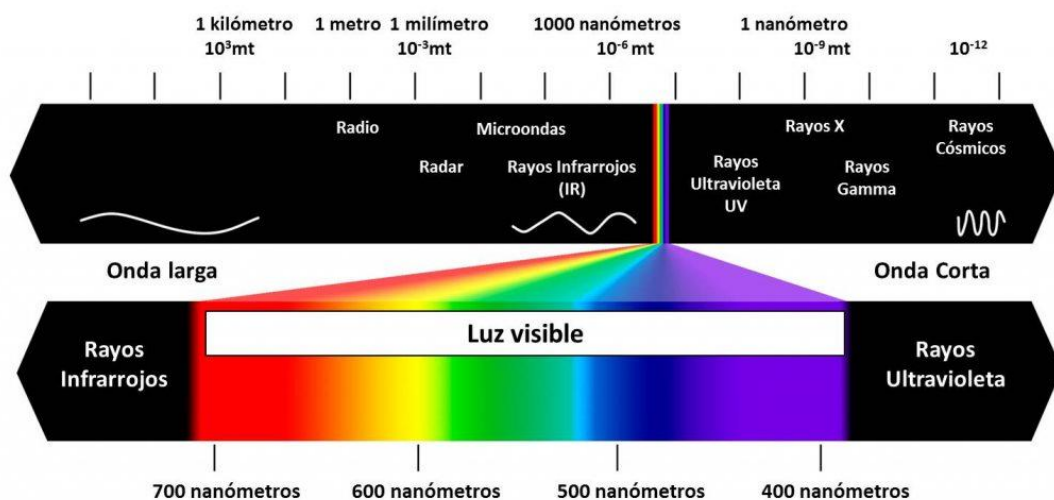


Figura #1: Espectro completo de la radiación electromagnética
(Colorado State University, 2016)

Como puede observarse en la Figura 1, la radiación electromagnética puede ser separada en distintas regiones dependiendo de su longitud de onda. La región de luz visible para el ojo humano está comprendida aproximadamente entre los 400 y 780 nanómetros de longitud de onda. La región con una longitud de onda menor a la de la luz visible se conoce como ultravioleta, y abarca toda la región menor a los 400 nanómetros; al llegar a los 10 nanómetros, la radiación se conoce como rayos X. Esta puede llegar a una longitud de onda mínima de 0.01 nanómetros. La radiación con una longitud de onda mayor a los 780 nanómetros se conoce como radiación infrarroja, y está comprendida entre los 780 nanómetros y 1 milímetro. Esta región puede dividirse en infrarrojo cercano, intermedio y lejano (Newton, 1730).

Al existir distintos tipos de interacción entre la radiación y la materia, se ha desarrollado distintas formas de análisis espectroscópico. Al darse un choque elástico, los átomos mantienen la misma energía cinética después de cada colisión, lo que da origen a técnicas como la espectroscopía por rayos X o por difracción de electrones. Al darse un choque inelástico, la energía no se conserva, por lo que la muestra sufre un aumento en temperatura. Esto permite que se lleve a cabo la anteriormente mencionada espectroscopía Raman. Por último, se tiene la absorción y emisión resonante de fotones; en las que la materia capta o libera radiación electromagnética, la cual puede ser utilizada para identificar una muestra dependiendo directamente de la región dentro del espectro de energía en el que se encuentre la radiación. Un claro ejemplo es la espectroscopía por absorción atómica. Al interactuar con la materia en diferentes formas dependiendo de su frecuencia y longitud de onda, la radiación electromagnética es utilizada a una cierta región para cada tipo de espectroscopía, siendo los más comunes en todo tipo de análisis los espectros UV/visible e infrarrojo cercano (Mahan, 1962).

La absorción de radiación perteneciente a la región ultravioleta/visible resulta en la promoción de un electrón hacia un estado excitado; en este caso, los electrones afectados son los de enlace entre las moléculas, por lo que el espectro resultante muestra picos de absorción que se relacionan con los tipos de enlace que posee el compuesto evaluado. Esto hace a este tipo de espectroscopía particularmente útil en la identificación de grupos

funcionales presentes en una molécula. Un espectro UV/visible también puede mostrar bandas anchas provenientes de transiciones electrónicas y vibracionales (López, 2003).

La espectroscopía de infrarrojo cercano se basa en la absorción de la radiación electromagnética comprendida en longitudes de onda de entre 780 y 2700 nanómetros. Este tipo de espectroscopía generalmente se utiliza para el análisis de muestras sólidas, gaseosas y líquidas. Sus resultados muestran la presencia de bandas anchas de intensidad baja causadas por las transiciones vibracionales intensas que se producen a estas longitudes de onda. Debido a esto, la espectroscopía infrarroja cercana puede usarse para identificar compuestos específicos y suele ser utilizada en las industrias farmacéuticas, de alimentos, y productoras de polímeros (Li, 2014).

B. Espectroscopía Raman

1. Contexto histórico

Descubierto en 1922 por el físico indio Chandrasekhara Venkata Raman, el efecto Raman es un tipo de dispersión inelástica que presenta un fotón al difractarse la luz monocromática. Raman determinó que además de la dispersión de Rayleigh, la cual no presenta una pérdida de energía al actuar como una colisión elástica, una fracción de los fotones se dispersa a frecuencias diferentes. Este fenómeno llegó a ser conocido más adelante como dispersión de Raman, y es causado por los modos de baja frecuencia de la materia condensada, como los cambios en los estados vibracionales, rotacionales, y electrónicos. La espectroscopía Raman se basa en este fenómeno (Hunt, 2011).

2. Aplicaciones

La espectroscopía Raman es una técnica no destructiva para extraer toda la información vibracional de una molécula, y puede ser utilizada en muestras sólidas, líquidas y gaseosas. Por estos motivos, suele ser empleada en la física de estado sólido para la caracterización de materiales, medición de temperaturas, y determinación de la orientación cristalográfica de una muestra; además de ser útil en el análisis de nanocables para obtener conocimiento de sus estructuras y evaluar sus propiedades (Heraberd, 1944).

Probablemente el uso más predominante de la espectroscopía Raman se encuentra en la industria farmacéutica, ya que puede utilizarse no sólo para identificar ingredientes activos en fármacos, sino también polimorfismos, lo que puede ser vital en la formulación de un compuesto al determinar las propiedades de sus componentes (Heraberd, 1944).

3. Funcionamiento

Los equipos de espectroscopía Raman suelen utilizar como fuente de luz un láser con una longitud de onda que se encuentre dentro del rango del espectro infrarrojo cercano, luz visible, o ultravioleta cercano; lo más común en equipos comerciales es una longitud de onda de entre 473 y 1064 nanómetros. Dicho láser interactúa con los modos de baja frecuencia presentes en una muestra; es decir, las vibraciones y movimientos intramoleculares, llevando la muestra a un estado virtual o nivel de energía teórico mayor al que normalmente se presenta. Esto causa un desplazamiento vertical por parte de la energía de los fotones del láser cuando la molécula libera la energía de la luz.

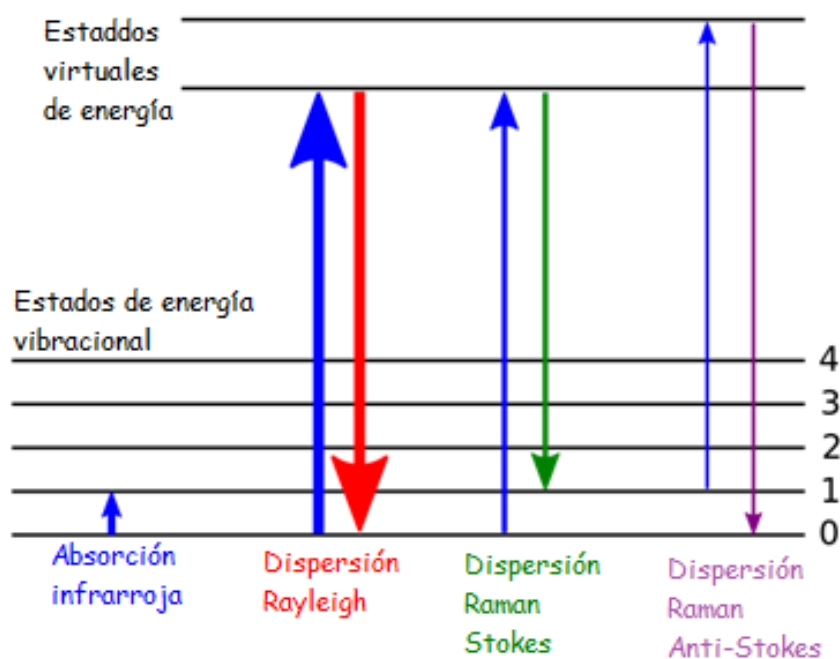


Figura #2: Diagrama de niveles de energía de dispersión Ryaleigh, Stokes, y Antistokes

(Ferrano, 2003)

La Figura 2 muestra los estados de una muestra implicados en la obtención de un espectro Raman. Al bombardear una muestra con radiación, los fotones inciden sobre la molécula, interactuando con los electrones pertenecientes a sus enlaces y excitándola a un estado virtual. En el caso de una molécula que se excita desde el estado basal a un estado de energía virtual, su posterior relajación hasta un estado vibracional excitado se conoce como dispersión Raman Stokes. Para moléculas que ya se encuentran en un estado vibracional excitado, la relajación termina en un estado inferior al inicial, y su dispersión resultante se denomina Raman anti-Stokes (Kumar, 2015).

La identificación de la muestra por medio de espectroscopía Raman depende del patrón de sus frecuencias de desplazamiento, el cual se determina por medio de sus estados vibracionales y rotacionales típicos. Para que la dispersión Raman pueda ser apreciada, se requiere que la molécula analizada presente un cambio en su potencial molecular de polarización o en la deformación de su nube de electrones; a mayor el cambio en polarizabilidad, mayor intensidad de dispersión Raman. Como se puede observar en el diagrama, la flecha roja correspondiente a la dispersión de Rayleigh es mucho más gruesa que las de Raman Stokes y anti-Stokes. Esto se debe a que la mayor parte de toda muestra presenta una interacción elástica con los fotones, lo que hace que la dispersión Raman sea relativamente débil. Por esta razón, es necesario filtrar las longitudes de onda cercanas a la línea del láser a manera de evitar la detección de la dispersión de Rayleigh. Se estima que alrededor de un fotón por cada cien millones presenta dispersión de Raman.

C. Diseño del sistema

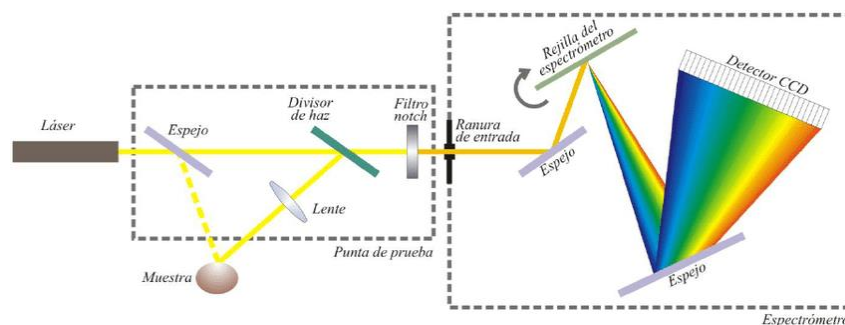


Figura #3: Diagrama del sistema para espectroscopía Raman

(Williamson, 2016)

El modelo estándar de un equipo utilizado para la espectroscopía Raman contiene los siguientes componentes:

- Fuente de luz

Al basarse en el principio de la dispersión inelástica de fotones, la espectroscopía Raman requiere una fuente de luz monocromática. Generalmente, se utiliza un diodo láser, pero es posible emplear una longitud de onda en el espectro de rayos X en algunos casos. La luz interactúa con los fotones en la muestra u otras excitaciones del sistema, resultando en variaciones en la energía de los fotones del láser (Nakamura, 1999).

- Filtro óptico

Un filtro Raman asegura que, al ser colocado en el camino del rayo de luz utilizado para el análisis, bloquea la línea del láser, evitando el ruido de la dispersión de Rayleigh y haciendo que sólo los fotones que presentan dispersión Raman puedan ser captados por el detector. Existen distintos tipos de filtros ópticos empleados en la espectroscopía Raman:

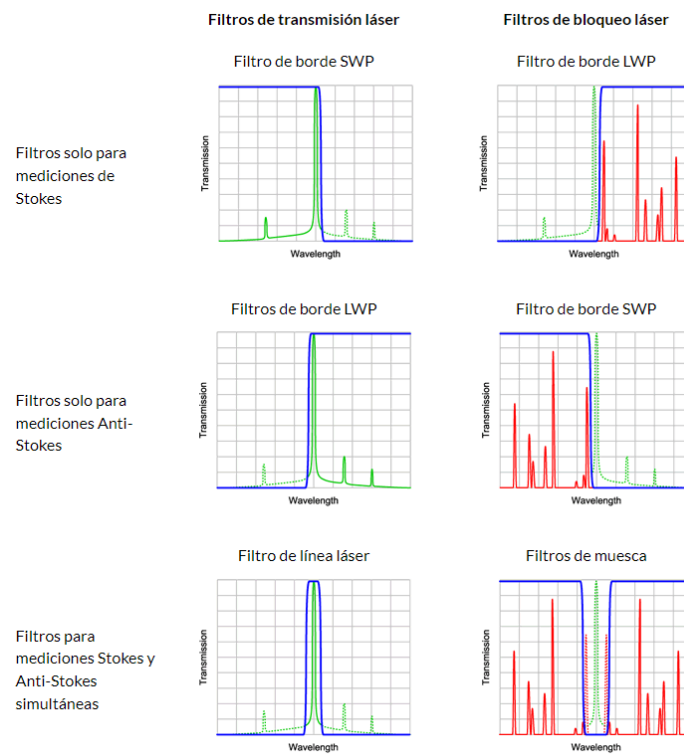


Figura #4: Esquema de funcionamiento de filtros ópticos

(Brown 2003)

Los filtros ópticos pueden ser catalogados en cuatro categorías: de borde de onda larga, de borde de onda corta, de muesca, y de línea láser. La Figura 4 muestra el funcionamiento de los distintos tipos de filtro, los filtros de borde bloquean todas las longitudes de onda hasta un límite dado. Se transmiten longitudes de onda más altas que el corte, es posible utilizar dos filtros de borde para obtener una longitud de onda específica (Brown. 2003).

Como también se observa en la figura, el mismo efecto se consigue al utilizar un filtro de muesca o de línea de láser; los filtros de muesca Raman tienen una banda nítida y discreta donde se bloquea la luz. Esta banda de absorción debe elegirse para que coincida con la longitud de onda específica del láser en uso, ya que normalmente tiene solo unos pocos nanómetros de ancho. Los filtros de línea láser Raman están diseñados para pasar una longitud de onda láser específica mientras bloquean el resto de la luz ambiental. Este filtro de paso de banda esencialmente limpia la señal del rayo láser y reduce el ruido (Kaylani, 2016).

- Divisor de haz

El divisor de haz es un tipo de prisma de refracción utilizado en los equipos de espectroscopía Raman. Este componente dispersa los fotones que atraviesan el filtro óptico para que sea posible conocer su posición exacta posteriormente. Es mayormente fabricado en forma de cubo, y está hecho de dos prismas de vidrio triangulares que se pegan en su base con adhesivos a base de poliéster, epoxi o uretano. Generalmente en la espectroscopía, se utiliza un divisor de haz asistido por un grupo de espejos alineados para dirigir la radiación deseada hacia el detector (Kumar, 2015).

- Espectrómetro

Un espectrómetro es un instrumento que se utiliza para medir la cantidad de luz que una muestra absorbe, refleja o emite en función de su longitud de onda. Los espectrómetros se utilizan en una amplia variedad de campos, desde la química hasta la astronomía, y son esenciales para el análisis de materiales y sustancias (Zammorano, 2004).

Las partes principales de un espectrómetro son las siguientes:

- *Rendija de entrada*: es una apertura angosta que permite que sólo la luz deseada llegue al interior del espectrómetro, a menor tamaño, mayor es la resolución del equipo. Muchos espectrómetros modernos utilizan un cable de fibra óptica en lugar de una rendija de entrada para dirigir la luz; esto permite una mayor movilidad y simplifica el proceso de calibración (Strong. 1968).

- *Monocromador*: un componente que contiene una gran cantidad de líneas en su superficie, las cuales dirigen la luz hacia distintas direcciones dependiendo de su longitud de onda, lo que permite seleccionar una longitud de onda específica de la luz de entrada y separarla en todos sus componentes para que estos sean captados por el detector. Estos dispositivos funcionan mediante el uso de elementos ópticos, como rejillas de difracción o prismas. Los monocromadores pueden ser ajustados para seleccionar diferentes longitudes de onda mediante el movimiento de los elementos dispersores o el ajuste de la distancia entre estos y la salida del monocromador (Brown. 2003).

- *Detector*: es la parte del espectrómetro que mide la intensidad de la luz en cada longitud de onda. Los detectores más comunes son los detectores de fotiodo, semiconductor complementario de óxido metálico (CMOS), y los dispositivos de carga acoplada (CCD); siendo estos últimos los más adecuados para la espectroscopía Raman. Este aparato se divide en una gran cantidad de pequeñas áreas sensibles a la luz conocidas como píxeles, convirtiendo las cargas eléctricas dependiendo de su intensidad en señales RGB o CMY, las cuales se pueden usar para ensamblar una imagen del área de interés. Los CCD son extremadamente sensibles a la luz. Eso hace que estos detectores sean adecuados para el análisis de la señal Raman inherentemente débil. También permite la operación multicanal, lo que significa que se puede detectar todo el espectro en una sola adquisición. Los CCD se utilizan mucho más allá de los sensores de las cámaras digitales. Las versiones que se utilizan para la espectroscopia científica son de un grado considerablemente más alto, para brindar las mejores características posibles de sensibilidad, uniformidad y ruido (Serrano, 2008).

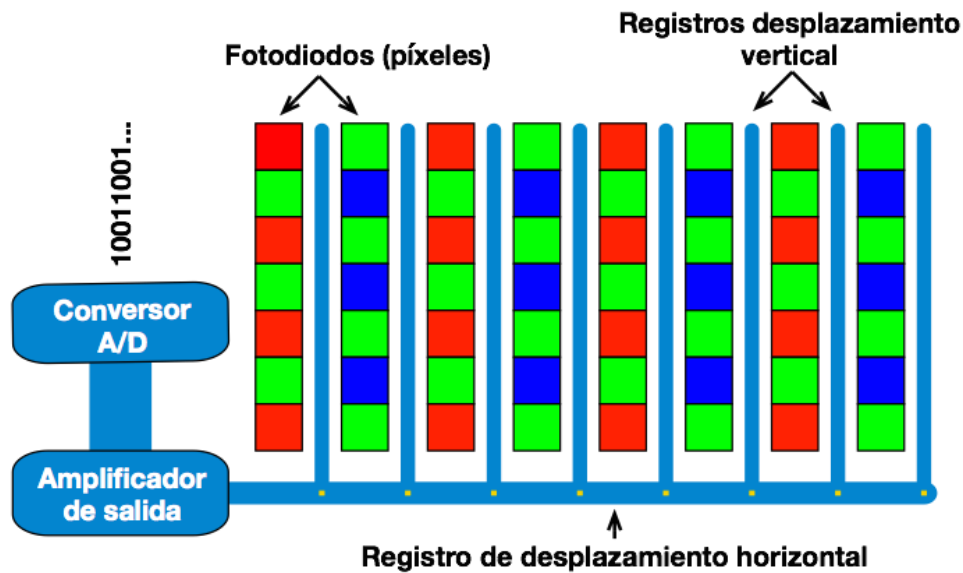


Figura #5: Diagrama de detector CCD

(Carrera, 2009)

- *Sistema de procesamiento de señales*: es el componente que convierte las señales eléctricas producidas por el detector en datos digitales que se pueden analizar y procesar.

- *Software de análisis de datos*: es el programa que se utiliza para analizar los datos espectrales y extraer información útil sobre la muestra.

Además de estos componentes, los equipos profesionales suelen utilizar una variedad de lentes para colimar y enfocar la luz; y espejos con curvaturas determinadas para dirigir y calibrar el equipo (Carrera, 2009).

D. Parámetros de los equipos de espectroscopía

Al evaluar un instrumento de espectrometría, el poder de resolución óptica del equipo es clave. Conocida generalmente como resolución espectral, se define como la mínima separación espectral entre picos que el instrumento puede resolver. Se expresa de la siguiente manera: $R = \lambda / \Delta\lambda$, donde λ es igual a la longitud de onda registrada (Kumar, 2015).

La resolución espectral de un instrumento puede significar la diferencia entre hacer o no la correcta identificación de una huella molecular, o entre dos o más líneas atómicas. Para aplicaciones tales como espectroscopia de ruptura inducida por láser, Raman y espectroscopia de emisión óptica, la resolución relativamente alta es muy importante. Dos componentes vitales para que un espectroscopio pueda considerarse útil son la precisión y la exactitud. Se conoce como precisión la distancia entre diferentes mediciones realizadas con un mismo instrumento. Una alta precisión indica que el equipo funciona de manera correcta, sin errores aleatorios que puedan causar una desviación en los resultados. La exactitud, por otra parte, se refiere a la cercanía de los datos a un estándar teórico. Una alta exactitud indica que el equipo está bien calibrado y es capaz de proporcionar resultados relevantes (Ormachea, 2013).

El rango de un equipo de espectroscopía determina el tipo de muestra que puede ser analizada. Para la dispersión Raman, las señales generalmente se encuentran entre los 500 y 2000 nanómetros, por lo que conviene utilizar una fuente de luz en el espectro visible y un detector capaz de captar radiación en el espectro visible e infrarrojo (Kumar, 2015).

V. METODOLOGÍA

A. Sitio de estudio

Universidad del Valle de Guatemala, zona 15, Ciudad de Guatemala, Guatemala.

B. Objetos de estudio

- Espectroscopio Raman elaborado con materiales de bajo costo.
- Muestra de acetona
- Muestra de peróxido de hidrógeno

C. Diseño, enfoque y tipo de investigación

Diseño longitudinal con enfoque experimental. Se realizó una serie de medidas repetidas utilizando el equipo fabricado.

Tipo de investigación: aplicada.

D. Tipo de muestra

Muestreo deliberado. Las muestras de acetona no proporcionan una señal Raman particularmente fuerte; sin embargo, se utilizó al estar disponible, haber presentado resultados identificables, y poseer un espectro teórico para generar una comparación.

El peróxido de hidrógeno no presenta una dispersión Raman notoria, por lo que se utilizó como control.

E. Criterios de inclusión y exclusión

Se incluyó pruebas con características idóneas para realizar las mediciones requeridas del equipo.

F. Variables (conceptualización y operacionalización)

Nombre	Descripción	Naturaleza	Nivel de medición	Codificación
Asequibilidad del equipo	Costo estimado total del equipo experimental en comparación a uno comercial.	Cuantitativa	Continua	Porcentaje
Resolución del equipo	Número máximo de picos espectrales que el espectrómetro puede resolver.	Cuantitativa	Discreta	Centímetros inversos
Exactitud del equipo	Concordancia entre una medida experimental y un valor real.	Cuantitativa	Continua	Porcentaje

Cuadro #1: Variables

G. Hipótesis

Alternativa

Los estudios realizados con un equipo de espectrometría Raman elaborado con materiales no profesionales proporcionarán un resultado con la eficacia suficiente para que el prototipo pueda considerarse funcional.

Nula

Los estudios realizados con un equipo de espectrometría Raman elaborado con materiales no profesionales no proporcionarán un resultado con la eficacia suficiente para que el prototipo pueda considerarse funcional.

H. Instrumentos de medición

Se utilizó el equipo fabricado en la primera fase del proyecto como instrumento para medir los parámetros de sus componentes.

El software utilizado para analizar y comparar los resultados obtenidos fue el programa de código abierto Spectragryph v1.2.16.1.

I. Procedimiento

Se realizó una evaluación de distintos diagramas de equipos de espectroscopía Raman de bajo costo para determinar los componentes necesarios para un prototipo funcional. A partir de estos modelos, se tomó varias medidas para minimizar costos: se optó por omitir la implementación de un filtro de línea láser; esto debido a que su única función en el equipo es la eliminación de ruido por parte de la fuente de luz, lo cual no debería presentar un inconveniente al utilizar un módulo láser con una longitud de onda conocida. La lista de materiales y sus respectivos precios se encuentran en la sección de anexos (ver Cuadro #2).

Se utilizó únicamente un filtro de muesca de 532nm para atenuar la luz del rayo original y hacer que esta no interfiriera en la lectura, en lugar de dos filtros de transmisión y bloqueo.

La fuente de luz utilizada fue un láser lineal de diodo con longitud de onda de 532nm y 12V de potencia acoplado a un módulo de control TTL, el cual cuenta con una conexión para un cable de 110 voltios.

El primer esquema contaba con un portaobjetos para microscopio, el cual cumpliría la función de divisor de haz. El componente demostró ser viable, sin embargo, fue eliminado en el diseño del primer prototipo, el cual enfocaba la fuente de luz directamente sobre la muestra para evitar la pérdida de radiación.

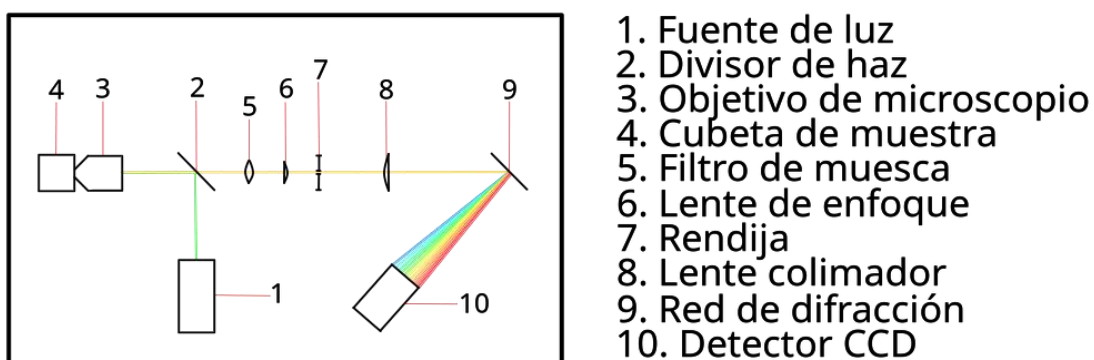


Figura #6: Esquema de un equipo de espectroscopía Raman simplificado

Para la estructura del espectrómetro, se optó por reducir costos eliminando el juego de espejos y utilizando una ranura de 0.05mm de grosor en lugar de un cable de fibra óptica. Se utilizó una cámara de video PULNIX modelo TM240T como detector, unida a un lente de enfoque ajustable de 8 mm. La distancia focal mínima para un lente de este ángulo suele oscilar entre los 8 y 15 cm; se determinó experimentalmente que la distancia óptima para el lente utilizado era de 8 cm. Bocetos de todos los diseños se encuentran en la sección de anexos.

Al ser originalmente diseñada como una cámara de vigilancia, esta cuenta con un sensor de tipo CCD y con el sistema de procesamiento de señales para proyectar una imagen. Se conectó la cámara a una fuente de energía para CPU modificada para ser conectada directamente a una corriente de 110V, y se envió la señal a una computadora utilizando un adaptador de tipo BNC a RCA, un cable con dos entradas tipo RCA, y un transformador de señal RCA a USB. El programa utilizado para transmitir la imagen en el monitor fue Honestech VHS to USB SE versión 5.0.

Se utilizó una parte de la cubierta reflectiva de un DVD lavada con etanol como rejilla de difracción, la cual cuenta con aproximadamente 1200 líneas por milímetro, por lo que es comparable a una rejilla de difracción comercial de 1000 l/mm. La calibración óptima para una rejilla estándar es de 45° en relación con la fuente de luz. Para lograr centrar el espectro en la superficie del DVD, se obtuvo el ángulo de Bragg utilizando la ecuación de difracción de Bragg (ver Cálculo #1).

Cálculo #1: Obtención del ángulo de incidencia

$$2 * d * \sin(\theta) = n * \lambda$$

Donde d es la distancia entre los planos de la red del DVD (aproximadamente 70 nm), lambda es la longitud de onda de la luz incidente (532 nm) y n es el orden de difracción (1 para la mayoría de las aplicaciones Raman). Despejando theta,

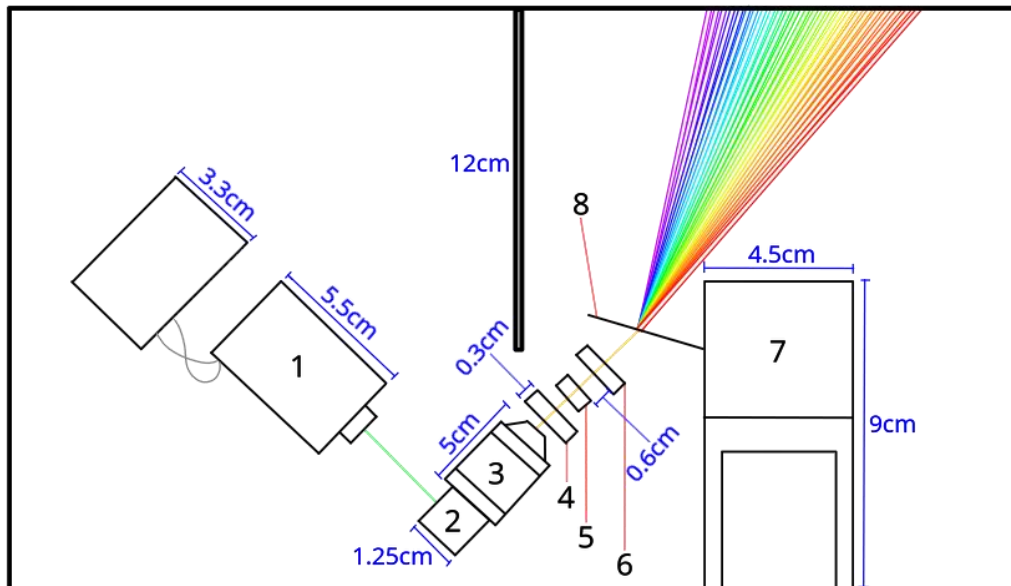
$$\theta = \arcsin (n * \lambda / (2 * d))$$

$$\theta = \arcsin (1 * 532 \text{ nm} / (2 * 70 \text{ nm}))$$

$$\theta = 47.1^\circ$$

Se determinó que el ángulo de incidencia de la luz en el monocromador debería ser de aproximadamente 47.1 grados.

Tomando esto en cuenta, se elaboró el prototipo 1 (ver Figura #7), para el cuál se intentó un diseño distinto al de un modelo convencional. Se colocó un contenedor cúbico para la muestra con dos aperturas en lados adyacentes, y se posicionó el monocromador al lado del detector para que su superficie difractara el rayo contra la pared de la estructura, para luego ser captada por el detector.



- | | | |
|----------------------------|---------------------|--------------------------|
| 1. Fuente de luz | 4. Filtro óptico | 7. Detector CCD |
| 2. Cubeta de muestra | 5. Lente de enfoque | 8. Rejilla de difracción |
| 3. Objetivo de microscopio | 6. Ranura | |

Figura #7: Esquema utilizado para la fabricación del prototipo 1

Este diseño demostró ser poco práctico, debido a que una gran parte de la luz impactaba el interior del contenedor para la muestra, por lo que sólo una fracción era recogida por el objetivo de microscopio y dirigida hacia el monocromador. Otra fuente de error en este prototipo fue el uso de un objetivo de microscopio con aumento de 100x, el cual no fue lo suficientemente grande para recoger una cantidad visible de luz. Un objetivo con un aumento mayor proporciona una mayor precisión, pero su distancia focal es menor, por lo que un lente con un menor aumento es más adecuado para obtener una señal más fuerte.

Por último, se observó una gran cantidad de luz residual dentro del sistema; esto se debe a que el modelo no separaba la parte óptica del espectrómetro, lo cual podría haber causado una interferencia en las lecturas.

Se fabricó el prototipo 2 (ver Figura #8) abordando las fuentes de error observadas. Para este modelo, se sustituyó el objetivo de microscopio por uno con aumento de 4x, se integró la ranura de entrada a una pared que separaba las dos partes del sistema.

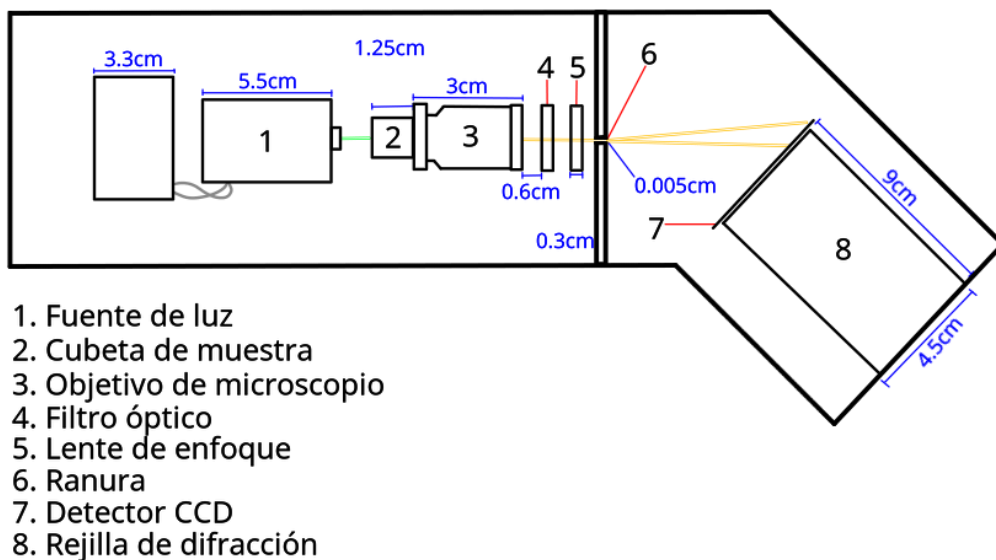


Figura #8: Esquema utilizado para la fabricación del prototipo 2

También se posicionó el objetivo de microscopio, filtro óptico y lente de enfoque directamente en frente de la muestra para que la fuente de luz pasara a través de ella, y se posicionó el monocromador de manera tradicional sobre el lente de la cámara.

El segundo modelo transmitió una señal al conectarlo a una computadora sin colocar una muestra en su interior, lo que indica que la parte óptica y el espectrómetro estaban alineados correctamente. Sin embargo, dicha señal no presentó cambios al introducir una muestra; se utilizó muestras de acetona con una pureza del 99.4%, peróxido de hidrógeno con una pureza del 33%, y una solución saturada de cloruro de sodio. Para determinar las fuentes de error, se separó la parte óptica del equipo y se utilizó un espectrómetro improvisado obtenido de PublicLab.org (Warren, 2017), con este equipo se evaluó nuevamente la parte óptica para determinar si existía dispersión. Al observar la luz saliente del lente de enfoque y la superficie del monocromador, se notó una dispersión leve, lo que prueba que la principal fuente de error se encontraba en el detector utilizado.

Se realizó una serie de pruebas con dos distintos detectores alternativos, las cuales mostraron resultados más acertados, pero aun así no lo suficientemente para considerar satisfactorios (ver sección de resultados y discusión). Se espera que el segundo prototipo sirva como una guía base para la fabricación de un equipo funcional, algunas posibles formas de optimización se indican en la sección de recomendaciones.

VI. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A. Determinación de la exactitud del equipo elaborado

Este estudio se realizó con el principal objetivo proporcionar una alternativa asequible a los espectroscopios comerciales. Para ello, se buscó elaborar un instrumento a partir de componentes no convencionales y evaluar su desempeño. A pesar de que se logró construir el instrumento y verificar que su diseño funciona correctamente, los resultados obtenidos en las pruebas con acetona y peróxido de hidrógeno no fueron satisfactorios al no mostrar dispersión alguna.

Se determinó por medio de una evaluación de la luz saliente de la parte óptica que la falta de dispersión de la muestra se debe principalmente al tipo de detector utilizado, el cual, a pesar de contar con un sensor de imagen con una alta sensibilidad a la luz de baja intensidad, no contaba con las características necesarias para captar las señales débiles Raman. Como alternativas al detector, se utilizó una cámara de celular LG K61 y una cámara profesional Nikon modelo COOLPIX B500. Se hará referencia a los equipos con detectores alternos más adelante como Prototipo 2.1 y Prototipo 2.2 respectivamente.

Se inició colocando una muestra de acetona en el contenedor y observando la superficie del monocromador. Se pudo distinguir una dispersión débil de color naranja rojizo, lo que prueba el funcionamiento correcto del monocromador. Sin embargo, no fue posible distinguir líneas características dentro del espectro, por lo que se infiere que la resolución del equipo no fue particularmente alta y, por lo tanto, que el equipo podría no ser apropiado para la realización de estudios.

Se repitió el proceso, esta vez utilizando la muestra de peróxido de hidrógeno. Esta generó una imagen color naranja claro en la superficie del monocromador, sobre la cual se pudo apreciar una serie débil de líneas delgadas, además de una leve dispersión en una longitud de onda menor a la de la fuente de luz, cerca de la parte azul del espectro. Esto concuerda vagamente con el comportamiento del espectro Raman teórico de la muestra en cuestión.

Luego de verificar el comportamiento de las muestras, se prosiguió a colocar la cámara de celular frente al monocromador para realizar pruebas concretas.

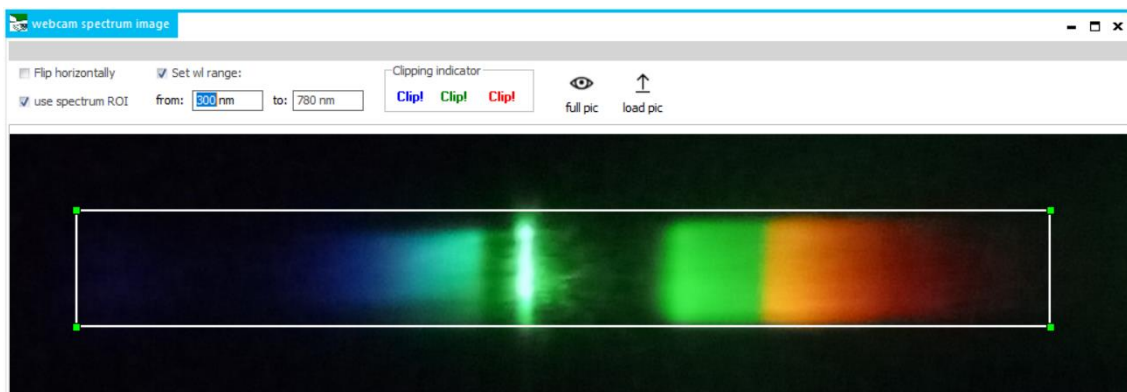


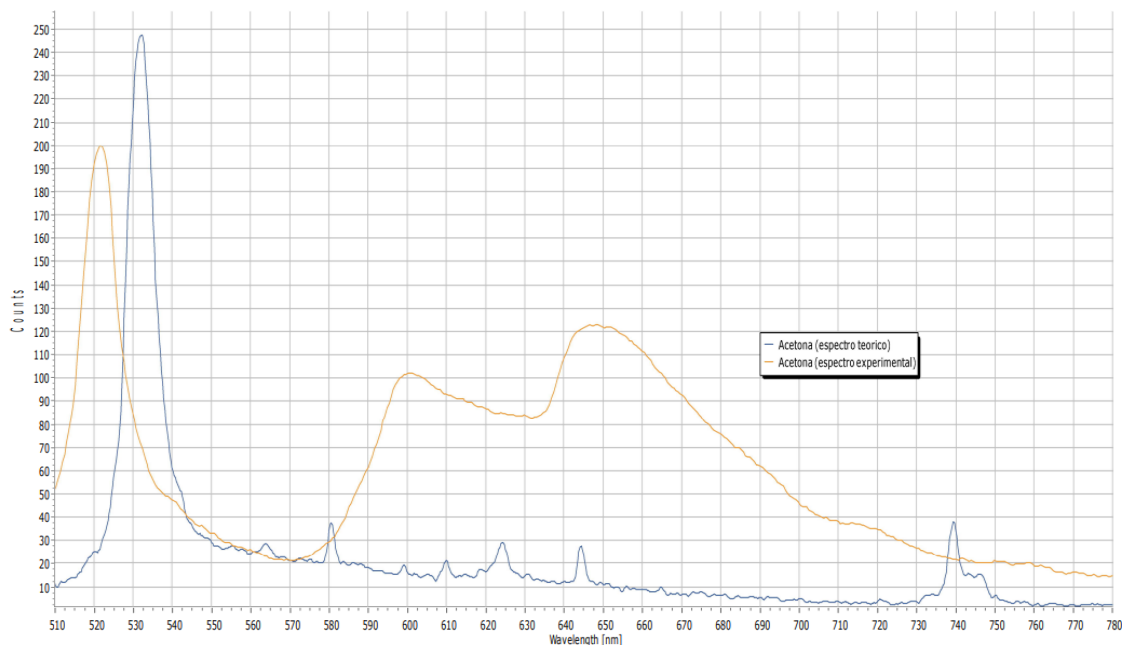
Figura #9: Imagen de un espectro Raman de acetona obtenido experimentalmente con el prototipo 2.1 en el software Spectragryph



Figura #10: Imagen de un espectro Raman de peróxido de hidrógeno obtenido experimentalmente con el prototipo 2.1

El espectro experimental de acetona presenta una gran cantidad de ruido. Esto se debe principalmente a que el detector no es apropiado para filtrar las señales; si se observa la Figura #9, la cual muestra la imagen utilizada para generar el espectro en cuestión, la señal captada por la cámara de celular se asemeja a la de una luz blanca, siendo la única excepción el corte abrupto que abarca la parte verde del espectro que fue atenuada por el filtro de muesca. La otra imagen obtenida utilizando el prototipo 2.1 (Figura #10) no muestra una diferencia significativa a pesar de ser el resultado de una prueba con peróxido de hidrógeno; esto prueba que el detector, al no estar diseñado para captar señales específicas, no cuenta con la precisión necesaria para este tipo de análisis. Dado esto, se

concluye que la implementación de una cámara de teléfono celular en el modelo fabricado no es viable. Al generar la siguiente gráfica con un espectro teórico (ver Figura #11), se puede apreciar que no hay similitudes entre las líneas, por lo que no es posible realizar una comparación directa.



Gráfica #1: Comparación entre un espectro Raman de acetona teórico y uno experimental obtenido con el prototipo 2.1. La línea azul del espectro teórico muestra un pico característico de la tensión C=O, el cual en este caso aparece en los 790 nm. Además de una vibración oop cerca de los 580 nm.

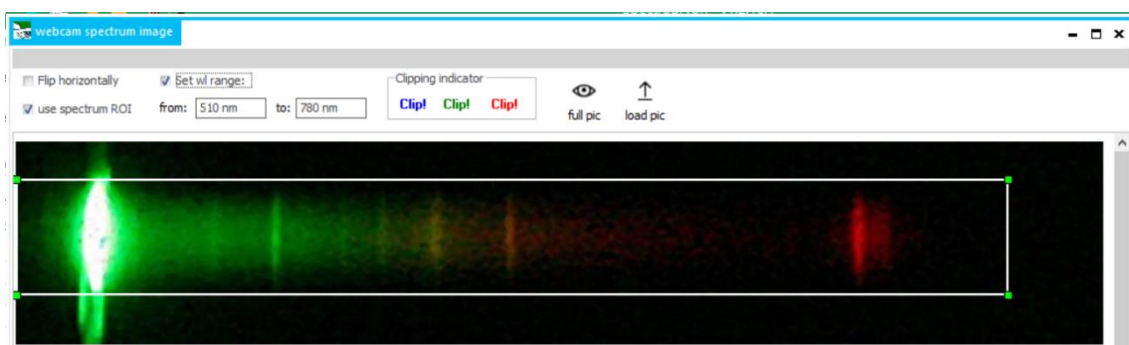
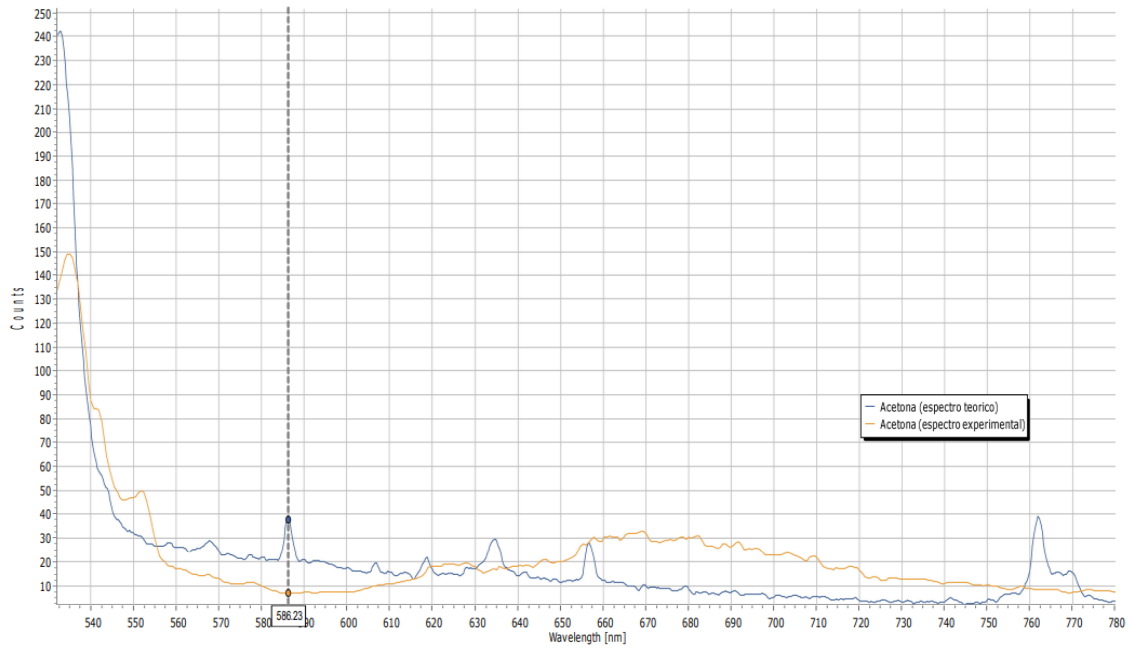


Figura #11: Imagen de un espectro Raman teórico de acetona en el software Spectragryph

Para la siguiente lectura, se utilizó una cámara de video profesional marca Nikon COOLPIX B500, la cual capturó la imagen mostrada en la Figura #12 utilizada para generar la siguiente gráfica:



Gráfica #2: Comparación entre un espectro Raman de acetona teórico y uno experimental obtenido con el prototipo 2.2. La línea azul del espectro teórico muestra un pico característico de la tensión C=O, el cual en este caso aparece en los 790 nm. Además de una vibración oop cerca de los 580 nm. Aun cuando algunos picos pueden apreciarse en la línea naranja, no existen coincidencias, por lo que no es posible hacer una comparación porcentual.

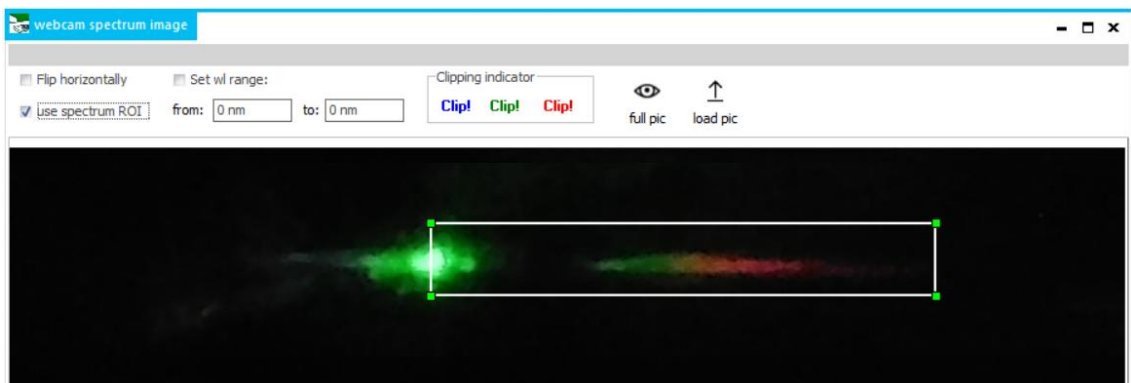


Figura #12: Imagen de un espectro Raman de acetona obtenido experimentalmente con el prototipo 2.2 en el software Spectragryph

La Gráfica #2 muestra una comparación entre un espectro teórico obtenido con un espectroscopio comercial (Figura #10) y la obtenida con el prototipo 2.2. En ella se muestra un espectro con picos más definidos y menos ruido que el anterior, lo que indica que el Prototipo 2.2 cumple su función mejor que el modelo previo.

La cámara utilizada cuenta con una función para variar el tiempo de exposición al generar una imagen, y posee una resolución y aumento mucho más altos que los otros detectores utilizados, sin embargo, esta también cuenta con un filtro infrarrojo, por lo que una gran parte de la señal puede ser bloqueada al analizar una variedad de muestras que presentan dispersión Raman en esta parte del espectro. Sumado a esto, al no contar con un espectrómetro diseñado específicamente para contenerla, no fue posible obtener el mejor resultado que este detector podría proporcionar. Se puede observar en la Gráfica #2 que el espectro experimental no concuerda con ninguno de los picos característicos de la acetona, por lo que el resultado no se presta para generar un espectro específico de dispersión Raman en el que se pueda evaluar la exactitud de la lectura.

Cabe mencionar que, aunque la cámara profesional demostró ser capaz de generar resultados un poco más acertados que los otros detectores empleados, su costo promedio es de Q3,400; por lo que reduce significativamente la asequibilidad del equipo.

Se debe considerar el error causado por las otras partes del equipo. Se sospecha que la carencia de un colimador influyó en la lectura al no contar con un espectro que se mantenga continuo a diferentes distancias, y como es de esperarse, componentes improvisados calibrados sin un equipo específico no proporcionan una señal al nivel de un equipo profesional. Se debe tomar en cuenta que el fin del proyecto es la reducción de precios necesarios para un modelo funcional, principalmente para ser empleado en demostraciones académicas y fomentar el conocimiento sobre la técnica.

Al observar los picos en las Gráficas 1 y 2, se puede concluir inmediatamente que los valores experimentales no son comparables con los valores teóricos, por lo que la exactitud del equipo sólo se puede catalogar como insuficiente.

B. Determinación de la resolución del equipo

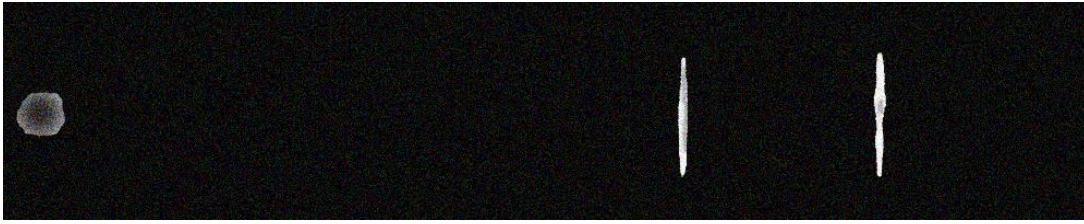


Figura #13: Interpolación de imágenes de señales láser de 532nm y 780nm
obtenidas con el prototipo 2

Se hizo uso de un módulo láser con longitud de onda de 532 nm y un puntero láser de 780 nm para generar un espectro sin muestra (ver Figura #13). Ya que la fuente de luz utilizada en el prototipo final fue el módulo de 532 nm, se utilizó el pico generado por dicho láser para obtener la resolución del equipo. Esto se realizó utilizando la fórmula $R = \lambda / \Delta\lambda$, detallada en el Cálculo #2:

Cálculo #2: Obtención de la resolución del equipo

Para calcular la resolución del equipo, necesitamos conocer el valor λ de la fuente de luz, en este caso 532 nm, y se puede convertir a metros de la siguiente manera:

$$\lambda = 532nm$$

La variable $\Delta\lambda$ es equivalente a la FWHM (siglas que se traducen en español a “Ancho Completo a la Mitad del Máximo”). Tomando en cuenta que el punto máximo del pico se encuentra a 244 sobre el eje y, este valor se obtiene de la siguiente manera:

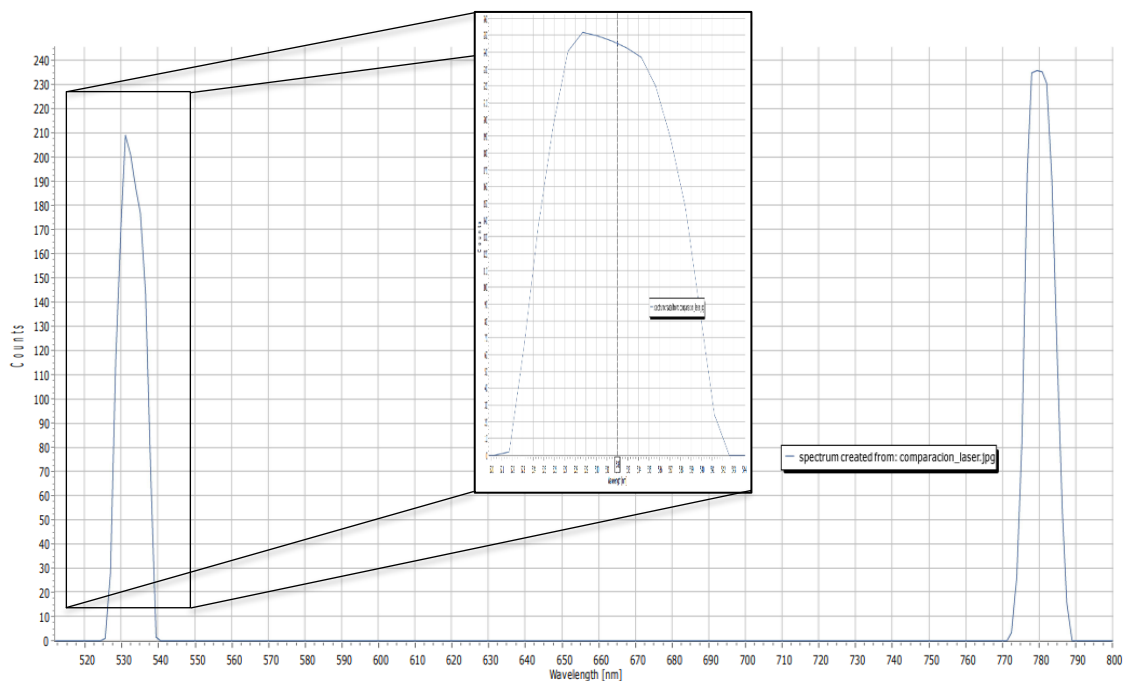
$$y_{max} = 252 \Rightarrow y_{med} = 122$$

$$\Delta\lambda = x_2 - x_1 = 539 - 524.2$$

$$\Delta\lambda = 14.8$$

Por lo tanto, la resolución del equipo sería:

$$R = \lambda / \Delta\lambda = 532nm / 14.8nm = 35.9cm^{-1}$$



Gráfica #3: Espectro teórico sin muestra utilizado para evaluar la resolución del equipo

La resolución del equipo es de 35.9 cm^{-1} , lo cual no es un valor particularmente alto considerando que un equipo de alta resolución suele tener un valor de aproximadamente 10 cm^{-1} . Sin embargo, es suficiente para distinguir la mayoría de las señales necesarias para determinar compuestos. La resolución de un instrumento de este tipo depende de varios factores; aunque la fuente de luz, filtros y lentes de enfoque influyen en este valor, principalmente la ranura de entrada y el monocromador definen la imagen que llega al detector. En este caso, la ranura de entrada utilizada fue de $5 \mu\text{m}$, la cual se considera una medida adecuada en instrumentos profesionales. Debido a la naturaleza artesanal del sistema, se sospecha que una mala calibración fue la principal fuente de error en esta medida. Algunas otras posibles formas de mejorar la resolución incluyen el uso de una rejilla de difracción profesional, un divisor de haz y, como se mencionó anteriormente, la implementación de un lente colimador.

C. Determinación de la asequibilidad del equipo

Como se muestra en el Cuadro #2 en la sección de anexos, el prototipo 2 puede ser replicado por un precio de aproximadamente Q1,705.00. Dejando un rango del 15%, el precio final aproxima a los Q2,000.00, un valor considerablemente bajo en comparación con los equipos comerciales. Últimamente, se ha encontrado una gran variedad de alternativas que disminuyen el costo total de un equipo de espectroscopía Raman. Aunque un equipo comercial certificado relativamente barato llega a costar alrededor de Q78,000.00, existen equipos más simples que han probado ser eficaces, como lo es el caso del equipo de código abierto OpenRaman (The Pulsar Engineering, 2023), el cual puede ser construido por un aproximado de Q17,500.00.

Precio promedio de modelo experimental	Q 2000.00
Comparación con modelo comercial	2.564%
Comparación con modelo de código abierto	11.429%

Cuadro #2: Comparación de precios entre modelos de espectroscopía Raman

Cabe mencionar que existen componentes alternos de mayor costo que pueden ser utilizados para hacer viable el equipo; un ejemplo de esto es la cámara utilizada en el prototipo 2.2. El presupuesto para un modelo en el que no se eliminan componentes y se utilizan algunas alternativas más costosas, se encuentra en el Cuadro #3 en la sección de anexos. En este diseño, se hace uso de un cable de fibra óptica, lo que permite una mayor recolección de la luz por parte del espectrómetro; además, se utiliza un filtro adicional para crear un corte más abrupto en la longitud de onda del láser saliente. Por último, como detector, se utilizó la cámara profesional que se puso a prueba en el modelo más económico, ya que esta demostró ser capaz de captar señales dentro del espectro esperado.

Asimismo, existen componentes con precios comparables a los de los utilizados en el prototipo 2, los cuales no fueron sometidos a pruebas. Es posible que un modelo que utilice estas partes llegue a ser funcional. A continuación, se detalla brevemente la base para un modelo alternativo que se descartó en este proyecto, y algunas sugerencias de componentes se encuentran en la sección de recomendaciones.

Existe una gran variedad de prototipos de equipos de espectroscopía Raman fabricados con el objetivo de minimizar costos. Un diseño alternativo que se consideró al observar las fallas del modelo evaluado involucra el uso de una unidad de recolección óptica, del tipo que se puede encontrar en un lector de discos. Varios estudios, incluyendo a (Ulčinas, 2016) y (Lee, 2014), demuestran que estos instrumentos contienen todas las partes ópticas necesarias para dirigir la luz desde una muestra hacia un detector, pudiendo ser empleados en la fabricación de microscopios ópticos y, por consiguiente, unidades de espectroscopía Raman. Cabe mencionar que se requiere conocimiento en varios temas de electrónica y óptica para elaborar un modelo funcional de este tipo, pero algunos detalles acerca de un posible diseño se encuentran en la sección de recomendaciones.

En resumen, el equipo final elaborado para este estudio (prototipo 2), presenta un costo de aproximadamente un 2.57% del costo promedio de un equipo comercial de baja gama, y un 11.43% en comparación a un equipo funcional de código abierto (ver Cuadro #2). La gran mayoría de los laboratorios e instituciones educativas cuentan con los recursos necesarios para la adquisición de un espectroscopio Raman cuya funcionalidad ha sido verificada, por lo que vale la pena considerar todas las opciones disponibles a la hora de realizar un estudio de este tipo. Al ser el equipo fabricado un modelo no funcional, estas cifras no se prestan para hacer una comparación directa; sin embargo, proporcionan una guía que puede ser útil para la ampliación del proyecto y, posteriormente, la elaboración de un prototipo que pueda ser utilizado por instituciones académicas para demostrar el uso de la técnica de espectroscopía Raman.

VII. CONCLUSIONES

Se descarta la hipótesis alternativa. Los estudios realizados con un equipo de espectrometría Raman elaborado con materiales no profesionales no proporcionarán un resultado con la eficacia suficiente para que el prototipo pueda considerarse funcional. Se determinó que la principal fuente de error está en el uso de una cámara de vigilancia como detector, ya que esta no logró captar las señales débiles producidas por la dispersión Raman; por este motivo, se infiere que el cambio más importante en el proceso es la obtención de un sensor adecuado. Aun así, se debe tomar en cuenta otros factores que representan fuentes de error. Estos incluyen las otras piezas empleadas, al ser productos no diseñados para este tipo de equipo; el uso de acetona, la cual no es particularmente idónea para un análisis Raman; y el diseño del prototipo, el cual se fabricó sin un equipo de calibración profesional y no cuenta con un programa de análisis propio para obtener resultados específicos.

Se cumplió con el objetivo de fabricar un prototipo de espectroscopio Raman con materiales no profesionales, y con la evaluación de su eficacia. Sin embargo, no fue posible obtener un dato concreto en cuanto a su exactitud, debido a que su desempeño fue insuficiente para la obtención de una lectura válida. La resolución del equipo es de 35.9 cm^{-1} , la cual es inferior a la de un equipo profesional, pero no tanto para considerarse obsoleta. En cuanto a la asequibilidad, el prototipo final representa un aproximado del 2.57% del precio de un equipo certificado y un 11.43% con relación a las partes para ensamblar de un equipo de código abierto; lo que representa un ahorro significativo. Sin embargo, se debe tomar en cuenta que el precio final mínimo de un prototipo funcional puede llegar a ser mayor que la cifra obtenida.

La fabricación y calibración de un equipo de espectroscopía Raman son procesos que requieren mucha precisión para llevarse a cabo correctamente, por lo que un modelo con partes no convencionales no siempre será viable. A pesar de que los resultados obtenidos no fueron los esperados, este proyecto proporcionó una base para la construcción y uso de un espectroscopio Raman. Se espera que los diseños, errores y recomendaciones detalladas en este proyecto sirvan como guía para futuros estudios que busquen elaborar un artefacto similar.

VIII. RECOMENDACIONES

- Se recomienda considerar el uso de un filtro de transmisión y uno de bloqueo en lugar de un solo filtro de muesca. Esto debería maximizar el área observable del espectro y atenuar la luz del rayo original de una forma más eficaz.

- Se recomienda utilizar una muestra que proporcione una señal Raman clara. Algunos ejemplos de compuestos que pueden conseguirse fácilmente y presentan una señal característica son el paracetamol y el ciclohexano.

- Del primer prototipo elaborado, se demostró que un diseño en el que se recoge la luz reflejada en una dirección perpendicular al láser resulta en una gran pérdida de luz. Debido a esto, se recomienda colocar la muestra directamente en frente de la fuente de luz para evitar ruido y pérdida de radiación si se omite la implementación de un divisor de haz.

- En caso de utilizar un objetivo de microscopio para dirigir la luz dispersada por la muestra, se recomienda optar por uno con el menor aumento posible si se tiene como prioridad obtener una señal fuerte. Un objetivo de mayor aumento sería viable si el modelo cuenta con una fuente de luz con una potencia mayor, y esto permitiría una mayor resolución en las lecturas. Sin embargo, cabe mencionar que la calibración de dicho objetivo debe ser mucho más exacta.

- Se recomienda no omitir la adición de un lente colimador en el espectrómetro. Este componente facilita en gran medida la calibración del equipo y permite utilizar medidas estándar para la fabricación del espectrómetro.

- Se recomienda que el detector utilizado sea un sensor tipo CCD; particularmente uno que no contenga partes que puedan llegar a modificar la posición de la luz en la imagen proyectada. Al no contar con una capacidad de detección suficiente para captar

las señales Raman tenues, la cámara de seguridad utilizada, a pesar de contener un detector CCD, no presentó resultados positivos.

- En caso de utilizar una cámara profesional, se recomienda verificar que el lente de esta no posea un filtro infrarrojo. Dicho componente puede ser removido fácilmente.

- Si se opta por omitir el juego de espejos comúnmente utilizado para espectrómetros, el ángulo de incidencia estándar entre la luz y la rejilla de difracción siempre será de 45° . Esto puede variar ligeramente dependiendo del ancho de la ranura de entrada y de las líneas por milímetro en la rejilla.

- Algunas sugerencias de detectores incluyen cámaras para microscopios, cámaras profesionales de video y, si se tiene un conocimiento extenso sobre programación, detectores CCD lineales acoplados a un lector de señales.

- Como fue mencionado al final de la sección Resultados y Discusión, Se ha determinado que el uso de la unidad de recolección óptica de un lector de discos puede utilizarse para la fabricación de un equipo de espectroscopía Raman. La Figura #20 muestra que, a excepción de los filtros, todos los componentes necesarios se encuentran dentro de la unidad. A continuación, se muestra brevemente una alternativa que podría ampliar la presente investigación.

- El diseño consiste en la adición de un filtro de muesca Raman entre el divisor de haz y el lente colimador, también se sugiere utilizar una fuente de luz diferente a la de la unidad óptica, debido a que estas suelen generar mucha energía calórica residual, y pueden no ser muy exactas en cuanto a potencia y longitud de onda.
- La unidad de recolección óptica debe conectarse a un generador de funciones, parte que servirá como fuente de energía. Una ventaja de este modelo es que el ciclo de trabajo y frecuencia pueden ser calibrados directamente en el generador de funciones dependiendo del tipo de muestra que se busque analizar.

- Una base para colocar la cubeta de muestra puede ser fabricada utilizando una impresora 3D, es importante que no entre luz del exterior.
- Se debe colocar un lente colimador adicional y conectar el aparato con un cable de fibra óptica a un espectrómetro.
- Se estima que el precio total promedio de un modelo elaborado con estas partes sería de alrededor de Q2,000.00, siendo el generador de funciones y el espectrómetro los componentes más costosos.

IX. Referencias bibliográficas

- ¹ A. Huzortey, B. Anderson, and A. Owusu. 2016. “*Designed and Developed Low Cost Raman Spectroscopic System,*” in *Frontiers in Optics 2016*, Rochester, New York, 2016, p. JTh2A.95.
- ² P. Williamson and J. Kiefer. 2016. “*Towards Low-cost Raman Spectroscopy by Using a Conventional CCD Camera,*” in *Imaging and Applied Optics 2016*, Heidelberg, 2016, p. JT3A.10.
- ³ BELMONTE, J. R. 2001. *Un espectroscopio sencillo*. Extraído de: <http://centros5.pntic.mec.es/ies.victoria.kent/Rincon-C/Practica/PR-14/PR-14.htm>
- ⁴ Carrera, Cristian & Iles, Pablo & Paucar, Luis & Proaño, Patricio. 2009. *Diseño, instalación y puesta en marcha de un sistema de circuito cerrado de televisión (CCTV), sistema de control de acceso de personal y vehículos para el terminal marítimo de Balao*.
- ⁵ Colorado State University. 2016. *How to Build a Spectrometer*. En: <https://www.colostate.edu/>
- ⁶ D. Allemand. 1970. “*Design Criteria for a Raman Spectrometer,*” *Appl. Opt.*, vol. 9, no. 6, p. 1304
- ⁷ Dunn, R. C. 2019. Compact, inexpensive refractive index detection in femtoliter volumes using commercial optical pickup technology. *Anal. Methods* 11, 2303–2310.
- ⁸ Harris, Daniel C., Michael D. Bertolucci. 1990. *Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Dover Publications
- ⁹ Heraberg, translated by J. W. T. Spinks, Dover Publications. 1944. *Atomic Spectra and Atomic Structure* (second edition). Gerhard Inc., New York 10014, 257 pp.
- ¹⁰ Heredia, C. 2006. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias*. 389-103. Extraído de: http://www.apac-eureka.org/revista/Volumen3/Numero_3_1/Heredia_2006.pdf
- ¹¹ Hunt, R. 2011. *History of Spectroscopy - an essay*. DOI: 10.13140/RG.2.2.21410.84169
- ¹² Terceros, O. Ormachea, O. Urquidi, and A. Villazón. 2016. “*Development of a Low Cost Spectrometer with Adjustable Grid and Wireless Electronic Control,*” *Rev. Politécnica*, vol. 37, no. 1, pp. 113–119
- ¹³ J. R. Ferraro, K. Nakamoto, and C. W. Brown. 2003. *Introductory Raman spectroscopy*, 2nd ed. Amsterdam; Boston: Academic Press
- ¹⁴ K. Nakamoto. 2009. *Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds*, 6th ed. Hoboken, N.J: Wiley
- ¹⁵ Kalyani, V., Sharma, V. 2016. *Different types of Optical Filters and their Realistic Application*. *Journal of Management Engineering and Information Technology*. Vol 3

- ¹⁶ Kasukurti, Aditya & Potcoava, M & Desai, Sanjay & Eggleton, Charles & Marr, D. 2011. Single-cell isolation using a DVD optical pickup. *Optics express*. 19. 10377-86. 10.1364/OE.19.010377.
- ¹⁷ Kumar, Naresh, Mignuzzi, Sandro, Su, Weitao, Roy, Debdulal. 2015. *Tip-enhanced Raman Spectroscopy: Principles and Applications*. DOI: 10.1140/epjti/s40485-015-0019-5
- ¹⁸ L. Strong. 1968, *A Spectrometer is Built for Less Than \$75*. *Scientific American*, 21%: 140
- ¹⁹ Lee, Y.-C., Chao, S., Huang, C.-C. & Cheng, K.-C. 2013. A compact optical pickup head in blue wavelength with high horizontal stability for laser thermal lithography. *Opt. Express* 21, 23556.
- ²⁰ López, F. 2003. *ANÁLISIS CONFORMACIONAL DE POLÍMEROS MEDIANTE ESPECTROSCOPIA INFRARROJA DE POLARIZACIÓN (DIR)*. *Revista Iberoamericana de Polímeros*. Venezuela.
- ²¹ Mahan, A. I. 1962, *Astronomical Refraction-Some History and Theories*, *AppOpt*, 1, 497
- ²² Newton, I. 1730, *Opticks: A Treatise on the Reflections, Refractions, Inflections and Colors of Light* (4th ed. Printed for W. Innys, West end, St Pauls)
- ²³ Menges, F. 2022. SPECTRAGRYPH. Optical Spectroscopy Software. En: https://www.ffmpeg2.de/spectragryph/down_databases.html
- ²⁴ Ormachea and O. Urquidi. 2013 “*Development Of A Diffraction Spectrometer And Its Control Program Using Commercial, Low-Cost Elements*,” *Rev Cub Fis*, vol. 30, no. 2
- ²⁵ Ormachea, A. Villazón, and I. Terceros. 2018. “*Analysis Of Mining Ore Concentrates With A Low Cost Portable Libs System*,” *Investig. Desarro.*, vol. 18, no. 1, pp. 81–90
- ²⁶ Ormachea, O. Urquidi, and D. Casazola. 2013. “*Development of a portable low-cost LIBS system*,” presented at the 8th Ibero American Optics Meeting/11th Latin American Meeting on Optics, Lasers, and Applications, Porto, Portugal, p. 87851D.
- ²⁷ Ormaechea, A. Villazón, and R. Escalera. 2017. “*A spectrometer based on smartphones and a low-cost kit for transmittance and absorbance measurements in real-time*,” *Opt. Pura Apl.*, vol. 50, no. 3, pp. 239–249
- ²⁸ P. D. Barnett and S. M. Angel. 2017. “*Miniature Spatial Heterodyne Raman Spectrometer with a Cell Phone Camera Detector*,” *Appl. Spectrosc.*, vol. 71, no. 5, pp. 988–995
- ²⁹ Pastor, J. 2003. *CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES POLÍMEROS MEDIANTE LA UTILIZACIÓN DE LA MICROESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL (RAMAN, FTIR Y FT-RAMAN)*. Exdraído de: <http://www.ehu.es/reviberpol/pdf/OCT03/pastor.pdf>
- ³⁰ R. P. Bauman, John Wiley and Sons. 1962. *Absorption Spectroscopy*, Inc., New York 10016, 611 pp.

- ³¹ Raman, C. V. & Krishnan, K. S. 1928. A new type of secondary radiation. *Nature* 121, 501–502. <https://doi.org/10.1038/121501c0>
- ³² Raman Spectrometers, Lasers, and Probes | StellarNet.us. 2022. StellarNet, Inc .
- ³³ S. Burikov, T. Dolenko, S. Patsaeva, Y. Starokurov, and V. Yuzhakov. 2010. “*Raman and IR spectroscopy research on hydrogen bonding in water-ethanol systems,*” *Mol. Phys.*, vol. 108, no. 18, pp. 2427–2436
- ³⁴ S. Nakamura. 1999. “*Laser diodes,*” *Optoelectronic properties of semiconductors and superlattices* 7, 1-44
- ³⁵ Serrano, J. 2008. *CURSO: INSTRUMENTACIÓN Y MÉTODOS DE ANÁLISIS QUÍMICO*. En: http://www.upct.es/~minaees/espectroscopia_infrarroja.pdf
- ³⁶ Teledyne Imaging is a Teledyne Technologies group of companies. 2022. *How a Charge Coupled Device (CCD) Image Sensor Works*. Extraído de: https://www.teledyneimaging.com/media/1300/2020-01-22_e2v_how-a-charge-coupled-device-works_web.pdf
- ³⁷ The Pulsar Engineering. 2023. *Open Raman: Your Open-Source Raman Spectrometer*. En: <https://www.open-raman.org/>
- ³⁸ Ulčinas, A., Picco, L. M., Berry, M., Heinrich Hörber, J. K. & Miles, M. J. 2016. Detection and photothermal actuation of microcantilever oscillations in air and liquid using a modified DVD optical pickup. *Sens. Actuators A Phys.* 248, 6–9
- ³⁹ V. Baeten and P. Dardenne. 2002. “*Spectroscopy: Developments in instrumentation and analysis,*” *Grasas Aceites*, vol. 53, no. 1
- ⁴⁰ VARETTI, E. L., VARETTI, A. S. y MALLO, L. (2009). *Construyendo un espectroscopio*. Extraído de: <http://pagciencia.quimica.unlp.edu.ar/spectrsc.htm>
- ⁴¹ Victor F. Weisskopf. 1968. *The Three Spectroscopies*, *Scientific American*, pp: 218: 15
- ⁴² Warren. 2017. *Build a papercraft spectrometer for your phone -- version 2.0*. Extraído de: <https://publiclab.org/notes/warren/11-30-2017/build-a-papercraft-spectrometer-for-your-phone-version-2-0>
- ⁴³ Y. Arakawa, and H. Sakaki. 1982. “*Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current,*” *Applied Physics Letters* 40, 939-941
- ⁴⁴ Y.-S. Li and J. S. Church. 2014. “*Raman spectroscopy in the analysis of food and pharmaceutical nanomaterials,*” *J. Food Drug Analysis.*, vol. 22, no. 1, pp. 29–48

X. ANEXOS

• Cuadros

Producto	Precio promedio
Objetivo de microscopio	Q 150.00
Filtro óptico notch	Q 250.00
Módulo láser de diodo 532nm	Q 400.00
Lentes de enfoque	Q 75.00
DVD	Q 10.00
Plancha de MDF	Q 35.00
Cámara PULNIX TM-240T	Q 350.00
Fuente de poder 12V	Q 175.00
Convertidor RCA a USB	Q 45.00
Cables eléctricos	Q 150.00
Pintura en aerosol	Q 40.00
Servicio de corte láser	Q 25.00
<u>Total:</u>	Q 1,705.00

Cuadro #3: Presupuesto de partes utilizadas para prototipo 2

Producto	Precio promedio
Objetivo de microscopio	Q 150.00
Filtro óptico de bloqueo	Q 350.00
Filtro óptico de transmisión	Q 350.00
Filtro de línea láser	Q 250.00
Cable de fibra óptica	Q 390.00
Juego de espejos	Q 950.00
Módulo láser de diodo 532nm	Q 400.00
Lentes de enfoque	Q 75.00
Rejilla de difracción 1000l/mm	Q 15.00
Plancha de MDF	Q 35.00
Cámara Nikon COOLPIX B500	Q 3,400.00
Cables eléctricos	Q 150.00
Pintura en aerosol	Q 40.00
Servicio de corte láser	Q 25.00
<u>Total:</u>	Q 6,580.00

Cuadro #4: Presupuesto para un prototipo sin omitir partes no esenciales

- **Imágenes**



Figura #14: Imagen de un espectro Raman sin muestra generada por el prototipo 2

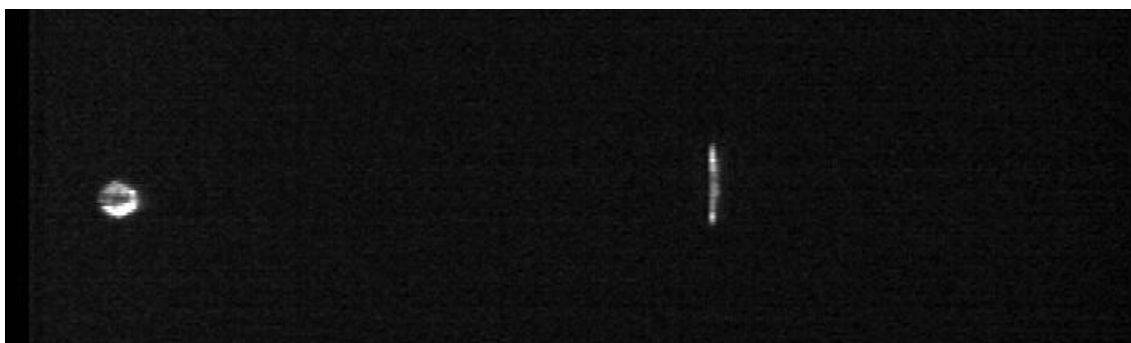


Figura #15: Imagen de un espectro Raman de acetona obtenido experimentalmente con el prototipo 2



Figura #16: Imagen de un espectro Raman de peróxido de hidrógeno obtenido experimentalmente con el prototipo 2



Figura #17: Prototipo 1



Figura #18: Prototipo 2 con una muestra de peróxido de hidrógeno



Figura #19: Prototipo 2.2 con una muestra de acetona

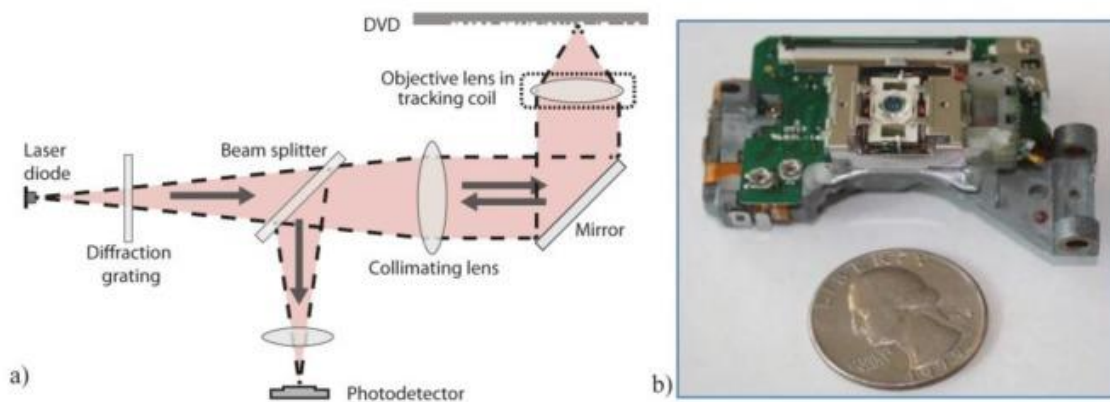


Figura #20: Estructura interna de una unidad de recolección óptica
(Kasukurti, 2011)