

GLOSARIO DE TÉRMINOS UTILIZADOS EN ESPECTROSCOPIA

Absorbencia: Medida de concentración del material presente: \log (de base 10) negativo de la Transmitancia ($-\log T$) del producto de coeficiente de extinción, paso óptico y la concentración escrito como $A = \epsilon bc$ y en función de T , $A = \log(1/T)$. La absorbencia es adimensional.

Absortividad: Probabilidad de absorber la luz a una longitud de onda particular por un analito específico bajo condiciones específicas, por ejemplo, pH, disolvente y temperatura. Así una cantidad específica de material a condiciones determinadas absorberá una fracción específica de la luz que chocó con él.

Absortividad: es abreviado por una ϵ o por una a . Se usa ϵ cuando la concentración se expresa en Moles/L y sus unidades son $L \text{mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$, a es para cuando las unidades de concentración son en cualquier otro tipo y se hace el ajuste que corresponda a la expresión $A/b(\text{cm})$ Concentración.

Ajuste: Es la selección de las condiciones apropiadas para el funcionamiento adecuado de un instrumento, o de un sistema de medición.

Alcance de medición: Conjunto de valores del mensurando, para los cuales se supone que el error de un instrumento de medición se encuentra entre límites especificados.

Analito: El material particular o cualidad a ser determinada en un análisis.

Anchura de Rendija: Tamaño de la abertura de la rendija a través de la cual emerge la luz. El tamaño depende del rango de la longitud de onda, habilidad de separación del selector de longitud de onda y aislamiento deseado de longitud de onda específica. Generalmente fijada o programada automáticamente.

Calibración: Conjunto de operaciones que establecen, bajo condiciones especificadas, la relación entre los valores indicados por un instrumento o un sistema de medición o los valores representados por una medida materializada y los valores correspondientes realizados por los patrones o materiales de referencia.

Colorímetros: Los colorímetros utilizan el ojo humano como detector y el cerebro como transductor. Los métodos colorimétricos requieren siempre la utilización de uno o más patrones en el momento en el que se realiza el análisis.

Concentración: La cantidad de un soluto en un volumen determinado de solución, Ej., moles por litro.

Corte de Disolvente: La longitud de onda en la cual el disolvente absorbe una porción significativa de la luz, causando una pérdida de la señal e inhabilidad para ejecutar un análisis. En otras palabras, el disolvente se vuelve opaco a las longitudes de onda usadas. Esto es común en el ultravioleta, raro en la zona visible. En forma práctica es la longitud de onda que corresponde a una absorbencia de uno, utilizando una celda de 1 cm de paso óptico.

Cubeta o celda: Receptáculo transparente en el cual las soluciones de muestra son introducidas en la senda de la luz del espectrómetro. Generalmente cuenta con dos lados iguales Ej., 1 cm, 1 cm mientras que la tercera dimensión es alargada posiblemente tan grande como 15 cm. Para trabajos en ultravioleta, el material es cuarzo. El trabajo en zona visible permite utilizar celdas de vidrio o plástico.

Curva de Calibración: Los resultados de una calibración cuando son graficados, generalmente en coordenadas Cartesianas, Ej., concentración (en molaridad) contra la absorbencia.

Detector: Dispositivo usado para detectar la intensidad de la radiación de la muestra de los haces de la muestra o referencia. Generalmente un diodo de silicio sencillo o un tubo fotomultiplicador más sensible.

Disolvente: Líquido usado para disolver la muestra a analizar. Comúnmente agua o metanol de alta pureza. Generalmente designado, especialmente o purificado para trabajo en ultravioleta, Ej., "Spectro-Quality" o "Spectro-Grade".

Espectro: Series de longitudes de onda de la radiación, pertenecientes a una porción específica del electromagnético continuo, Ej. El espectro visible, donde los "colores" son examinados aumentando la longitud de onda. Para la porción visible del continuo, los colores son rojo, anaranjado, amarillo, verde, azul, índigo y violeta.

Espectrofotómetro de Doble Haz: Es un instrumento en el cual el haz se divide para permitir la comparación de la muestra y el disolvente (o reactivo que sirve como blanco) al mismo tiempo. Por lo general, la operación de este aparato está muy automatizada.²

Espectrofotómetro de Simple Haz (Un solo haz): Es un instrumento que tiene una trayectoria óptica. La muestra y el disolvente puro (o el reactivo que funciona como blanco) se examinan por separado para establecer P y P_0 y realizar las mediciones de absorbencia. Por lo general, se opera en forma manual.

Error aleatorio: Es el resultado de una medición menos la media de un número infinito de mediciones del mismo mensurando, efectuadas éstas en condiciones de repetibilidad.

Error de medición: Es el resultado de una medición menos un valor convencionalmente verdadero del mensurando.

Error sistemático: Es la media que resultaría de un número infinito de mediciones del mismo mensurando, efectuadas bajo condiciones de repetibilidad, menos un valor verdadero del mensurando.

Exploración: El proceso en donde el rango de longitud de onda del sistema es inspeccionado en orden, generalmente de la longitud de onda más baja a la más alta. Esto generalmente ocurre cuando la red de dispersión es rotada sobre su eje.

Extinción/Coeficiente de Extinción: Sinónimo para la absorbencia y la absorptividad, respectivamente.

Fotómetro: Es un dispositivo sencillo relativamente barato para los análisis por absorción. El equipo utiliza una lámpara de filamento de tungsteno, lentes para proporcionar un haz paralelo de radiación, un obturador, un filtro, un atenuador de haz en forma de cuña y un detector (microamperímetro).

Fototubo: Es un detector fotoeléctrico común para las regiones ultravioleta-visible e infrarrojo cercano y se encuentra en los instrumentos más baratos.

Frecuencia: El número de veces por unidad de tiempo que la magnitud de una onda electromagnética va de un máximo a un mínimo y posteriormente regresa a la amplitud máxima. La unidad para el número de ondas por segundo es el hertz (Hz).

Fuente: También conocida como "lámpara". Este es el origen de la luz utilizada en el espectrómetro, y puede ser una fuente incandescente para la zona visible o una lámpara de descarga de gas de deuterio para el ultravioleta.

Incertidumbre de medición: Parámetro asociado al resultado de una medición, el cual caracteriza la dispersión de los valores que se podrían atribuir razonablemente al mensurando.

Lámpara de Tungsteno: Es una lámpara de luz, eléctrica, que tiene un filamento calentado por electricidad y que es tungsteno metálico. Al igual que otros sólidos incandescentes, el filamento da una longitud de onda continua que se aproxima a la "radiación de cuerpo oscuro". En condiciones normales de operación, la lámpara es adecuada como una fuente para la región visible del espectro y es útil sólo para distancias cortas en las regiones ultravioleta e infrarrojo.

Ley de Beer: Relación entre la cantidad de luz absorbida por un analito y su concentración, paso óptico (b) y absorptividad (a), expresada en gramos por 100 mL o molaridad, escrito como $A = \epsilon bc$.

Ley de Bouguer: Algunas veces se le llama ley de *Lambert*. Dividamos un medio absorbente homogéneo en capas imaginarias de igual espesor. Cada capa absorbe la misma fracción de radiación monocromática que choca contra ella. Con todas las demás sucede lo mismo y la absorbencia es directamente proporcional a la longitud de la trayectoria del haz a través del medio.

Ley de bouguer-Beer: Es una combinación de las leyes de *Bouguer* y de *Beer*. Con frecuencia se escribe como $A = \epsilon bc$, en donde A =absorbencia, ϵ =absorptividad molar y b =longitud de la trayectoria de haz (paso óptico) a través de una solución con una concentración molar de soluto igual a c .

Líneas de Franhoufer: Son las líneas oscuras en el espectro del sol y que son ocasionadas por la absorción de la envoltura solar que está más fría que la superficie. Es de especial interés histórico para la espectrofotometría de absorción atómica.

Límite de Cuantificación: Es la concentración más pequeña con la que pueden realizarse medidas

cuantitativas, en base a la desviación estándar y la pendiente de la curva de calibración, puede expresarse como $LC=10\sigma/S$ donde σ es la desviación estándar de las lecturas de la referencia y S es la pendiente de la curva de calibración

Límite de Detección: La cantidad, más pequeña de analito que puede ser vista sobre el nivel de ruido del instrumento, esto es lo que puede detectarse para un nivel de confianza dado. Está determinado por el análisis de muestras con concentración desconocida de analito y por el establecimiento del nivel mínimo al cual puede ser detectable. Basado en la desviación estándar de la respuesta y la pendiente de la curva de calibración se expresa $LD=3\sigma/S$, donde σ es la desviación estándar de las lecturas de la referencia y S es la pendiente de la curva de calibración.

Lineal: Línea recta: En el contexto, esto significa que para el doble de concentración del analito la señal de absorbencia será duplicada. Esto permite la predicción de la concentración utilizando la curva de calibración.

Linealidad: Un experimento que demuestra que la respuesta de un instrumento cambia de una manera previsible con el incremento de analito.

Longitud de Onda: La distancia de una cresta, de una onda electromagnética a la misma posición en la onda subsecuente. Distancia pico a pico, generalmente medida en nanómetros.

Luz Extraviada (luz parásita): Cualquier radiación que llega al detector que no es emitida por la muestra a la longitud de onda seleccionada.

Magnitud (Medible): Atributo de un fenómeno, de un cuerpo o de una sustancia, el cual es susceptible de ser identificado cualitativamente y determinado cuantitativamente.

Material de referencia: Material o sustancia para el cual uno o varios, de los valores de una o varias, de sus propiedades son lo suficientemente homogéneos y bien establecidos para ser utilizados en la calibración de un instrumento, en la evaluación de un método de medición, o para asignar valores a las propiedades de otros materiales

Material de referencia Certificado: Material de referencia, acompañado de un certificado, para el cual uno o varios, de los valores de una o varias, de sus propiedades están certificados por medio de un procedimiento que establece su trazabilidad a una realización exacta de la unidad en la que se expresa el valor de cada propiedad. Cada valor certificado se especifica con su incertidumbre respectiva.

Matriz: Medio en el que se encuentra el analito.

Mensurando: Magnitud particular sujeta a medición.

Método de medición: Secuencia lógica de operaciones, descritas de manera genérica.

Monocromador: En los espectrofotómetros es un instrumento que aísla una banda estrecha de longitud de onda de toda la energía radiante que llega hasta él. Sus partes principales son un elemento dispersante (un prisma o una rejilla de difracción) y un sistema de rendijas.

Nanómetro, nm: Antiguamente milimicrón o milimicra, $m\mu$. Es una unidad común para la longitud de onda, en particular para la región ultravioleta-visible. $1\text{ nm}=10^{-9}\text{ m}$.

Paso Óptico: La distancia por la que pasa la luz a través de la muestra y su contenedor. En términos prácticos la dimensión de la cubeta o celda.

Patrón de Medición: Medida materializada, instrumento de medición, material de referencia o sistema de medición, destinado a definir, realizar, conservar o reproducir una unidad o uno o varios valores de una magnitud para servir de referencia.

Protocolo: Instrucciones detalladas para la realización de todos los aspectos de un programa de medición.

Razón Señal/Ruido: La razón numérica de la señal total a 100% de Transmitancia al ruido del instrumento.

Red de Dispersión: Una superficie de reflexión cubierta con ranuras microscópicas uniformemente espaciadas, cuyo propósito es separar las longitudes de onda individuales de la luz blanca. La distancia entre las ranuras y el ángulo de las caras está determinada por las longitudes de onda a separar. La red de dispersión (excepto para arreglo de diodos) es rotada a una velocidad determinada y la longitud de onda

deseada es emitida a través de una rendija de salida sobre la muestra o el estándar.

Referencia. (Blanco): En el contexto, todo lo que está en el paso de luz de la muestra excepto el analito de interés: cubeta, disolvente y cualquier buffer o matriz para preparar la muestra.

Región Ultravioleta: Es una porción del espectro electromagnético que se encuentra entre el final de la longitud de onda larga de la región de los rayos X, aproximadamente a 40 nm (400 Å), y el límite violeta de la región visible, cerca de los 400 nm (4 000 Å). Los químicos emplean de rutina bandas de absorción entre 200 y 400 nm.

Repetibilidad (de los resultados de mediciones): Proximidad de la concordancia entre los resultados de las mediciones sucesivas del mismo mensurado, con las mediciones realizadas con la aplicación de la totalidad de las siguientes condiciones: el mismo procedimiento de medición, el mismo observador, el mismo instrumento de medición utilizado en las mismas condiciones, el mismo lugar o la repetición dentro de un periodo corto de tiempo.

Reproducibilidad (de los resultados de mediciones): Proximidad de la concordancia entre los resultados de las mediciones del mismo mensurado, con las mediciones realizadas haciendo variar las condiciones de medición. Las condiciones que se pueden variar pueden ser: método de medición, observador, el instrumento de medición, el patrón de referencia, el lugar, las condiciones de uso, el tiempo.

Ruido: Cualquier señal generada por el detector que no responde directamente a la luz transmitida en la longitud de onda requerida.

Selectividad: La selectividad de un método analítico denota el grado de ausencia de interferencias debidas a otras especies contenidas en la matriz de la muestra.

Sensibilidad: La sensibilidad de un instrumento o de un método analítico mide su capacidad de discriminar entre pequeñas diferencias en la concentración del analito. Dos factores la limitan, la pendiente de la curva de calibración y la reproducibilidad o precisión del sistema de medida. La *sensibilidad de calibración* es la pendiente de la curva de calibración a la concentración de interés. La *sensibilidad analítica* se expresa como $\gamma = S/\sigma$, donde S es la pendiente y σ la desviación estándar de las mediciones.

Sensor: Elemento de un instrumento de medición o de cadena de medición, que está directamente afectado por el mensurado.

Señal: La salida del detector debida a su respuesta a la luz emergente del contenedor de la muestra o de referencia.

Sesgo: La diferencia entre los resultados de prueba esperados y el valor de referencia aceptado. El sesgo es el error sistemático total en contraste con el error aleatorio.

Técnica: Principio químico o físico utilizado separadamente o en combinación con otras técnicas para analizar la composición de los materiales.

Titulación Fotométrica: Es una titulación en la cual el punto final se detecta por medio de mediciones de absorbencia.

Transmitancia, T: Es la fracción de la energía radiante incidente que transmite o emite la muestra. $T = P/P_0$. A menudo se expresa como un porcentaje: $\%T = (P/P_0) \times 100$.

Trazabilidad: Propiedad del resultado de una medición o de un patrón de medición, por medio de la cual estos pueden relacionarse a referencias establecidas, generalmente patrones nacionales o internacionales, por medio de una cadena ininterrumpida de comparaciones teniendo todas ellas incertidumbres determinadas.

Tubo de Descarga de Hidrógeno: (Con frecuencia es de deuterio.) Es una fuente para la espectrofotometría de ultravioleta en la cual las líneas de emisión del gas de relleno (H_2 o D_2) tienen un ensanchamiento de presión suficiente para proporcionar una longitud de onda continua a través de la región ultravioleta.

Tubo Fotomultiplicador: Es un detector fotoeléctrico común para las regiones ultravioleta-visible e infrarrojo cercano; más sensible que los fototubos ordinarios, se encuentra en los mejores instrumentos.

Transmitancia: Razón del poder radiante transmitido por una muestra al poder radiante transmitido por una

referencia, en una celda equivalente o por algunos medios de compensación para la absorción, pérdidas por reflexión, etc. Se relaciona con A mediante $T=1/10^A$ y se expresa en porcentaje.

Validación: Confirmar objetivamente el cumplimiento de requisitos particulares para un uso específico propuesto.

Validación de método: Es el proceso de establecer las características de desempeño y limitaciones de un método de medición y la identificación de aquellas influencias que pueden modificar estas características y a que grado le afectan.

Valor de blanco (en medición): es la lectura o resultado originado por la matriz, reactivos y cualquier sesgo residual, en un proceso o instrumento de medición que contribuye al valor obtenido de una magnitud en el procedimiento de medición analítica.

Verificar: Confirmar objetivamente el cumplimiento de requisitos para el funcionamiento de un instrumento o de un sistema de medición.

Visible: La porción del espectro electromagnético detectable por el ojo humano. La porción del espectro desde 350 780 nm.