

## PREFACIO

Este manual es una revisión general de las *técnicas instrumentales* que se emplean en los laboratorios modernos para analizar muestras ambientales con fines tanto de *monitorización* como de *investigación*. Todo estudio químico de un sistema ambiental debe partir del conocimiento de *lo que el sistema contiene (análisis cualitativo)* y *en qué concentración está (análisis cuantitativo)*. No es posible sin esa información saber qué *tratamientos* hay que aplicar para *restaurar* el sistema ni cómo evolucionan dichos tratamientos. No se puede estudiar cuál es la *dinámica fisicoquímica* (transporte, reactividad, degradación) de los contaminantes si se ignora cuáles son y en qué proporción están en cada momento.

Los *métodos clásicos* de análisis químico (gravimetrías y volumetrías) son *lentos* y a menudo *subjetivos*. Hoy día, en los laboratorios de análisis de muestras ambientales esos métodos han quedado relegados y han sido sustituidos por el **análisis instrumental**, que, como su nombre indica, se realiza empleando *aparatos*. Estos pueden medir muy variadas **propiedades fisicoquímicas** de las sustancias químicas, las cuales cabe relacionar con su naturaleza y con su concentración. Aunque en general los instrumentos son costosos, este inconveniente queda suplido con creces por su propiedad de poder realizar *en brevísimo tiempo* un análisis químico con una gran *precisión*, incluso cuando las muestras son tan complejas como las ambientales. Además, puede hacerse *in situ* (con *instrumentos portátiles* o *laboratorios móviles*) y de forma *continua* y *automatizada*.

Existen decenas de *métodos instrumentales* según el *principio fisicoquímico* de que se haga uso (medida de la absorción, emisión o dispersión –cambio de dirección– de la radiación; comportamiento de los iones al moverse en el interior de un campo magnético; respuesta de las sustancias químicas al elevar su temperatura; capacidad de la materia de generar corriente eléctrica o de conducirla, posibilidad de algunos compuestos de ser transformados en radiactivos...). En este manual se tratan de manera *introductoria* los métodos que se emplean en la inmensa mayoría de los casos: *espectroscopía atómica, ultravioleta, infrarroja, Raman, de resonancia magnética nuclear, espectrometría de masas, potenciómetría, voltamperometría, conductimetría, culombimetría, electrogravimetría, técnicas radioquímicas, térmicas y cromatográficas*, además de *métodos automáticos*. Dentro de cada método se ha tratado de explicar de forma no por simplificada menos rigurosa los principios que subyacen, así como su aplicación práctica en los laboratorios.

Por ello, este manual también puede resultar útil a los estudiantes de otras disciplinas que necesiten adquirir una visión general de las modernas técnicas instrumentales que se emplean en los laboratorios de análisis químico.

Los autores de este manual agradecerán a todos sus usuarios la comunicación a la *web* del libro ([triplenlace.com/aula-libros/tfqma/](http://triplenlace.com/aula-libros/tfqma/)) de cualquier errata, comentario, sugerencia, crítica, errata o error que puedan detectar. Estos se recogerán en la propia web, donde también aparecen enlaces a otras páginas de interés. La intención primordial ha sido escribir una obra que se pueda estudiar *a distancia* si fuera necesario.

Toda contribución a mejorar futuras ediciones de este manual para lograr más eficazmente el cumplimiento de estos fines será agradecida.

## *Organización de la obra*

Este libro se divide en 12 temas. Los dos primeros presentan una serie de *herramientas experimentales y teóricas* preparatorias del análisis químico o útiles para interpretar correctamente los datos. Analizar instrumentalmente una muestra no es simplemente *ponerla en el instrumento de medida*. Primero hay que *tomarla*, y esa no es una tarea trivial porque hay que garantizar que la muestra recogida sea *representativa* del sistema en el que se encuentra. Por otro lado, las muestras ambientales suelen ser muy *complejas*, lo que dificulta el análisis de las sustancias de interés. Por ello hay que someterlas a ciertos *tratamientos previos* que permitan separar estas sustancias de las demás para *determinar su concentración sin interferencias*. De estos aspectos del análisis (*muestreo y preparación de la muestra*) se ocupa el tema 1. En segundo lugar, no se pueden aceptar los resultados de un análisis sin *espíritu crítico*. El analista comete errores y los instrumentos también son susceptibles de ello. Es preciso, pues, adquirir *elementos de juicio estadísticos* para conocer hasta qué punto se puede estar seguro de que los errores no superan (probabilísticamente hablando) un cierto valor.

Las demás partes del libro tratan propiamente de las técnicas instrumentales a disposición del químico ambientólogo para estudiar la contaminación química del medio. Los temas 3 y 4 están dedicados fundamentalmente a las *técnicas espectroscópicas* que permiten realizar (sobre todo) *análisis elementales*: la **espectroscopía atómica** (*absorción, emisión y fluorescencia*) y la de **fluorescencia de rayos X** (con un importante apartado en el tema 4 dedicado a la **difracción de los rayos X**).

Los temas 5, 6, 7 y 8 presentan las familias de *técnicas espectrométricas moleculares*: la **espectroscopía ultravioleta-visible** (*absorción y fluorescencia*), las **espectroscopías vibracionales** (*infrarrojo y Raman*), la **espectroscopía de resonancia magnética nuclear** y la **espectrometría de masas**. Cada una de ellas se basa en sus propios y específicos principios (estudio de transiciones electrónicas, de vibraciones moleculares, de transiciones nucleares y de interacción de los iones en movimiento con un campo magnético, respectivamente), pero todas tienen las mismas aplicaciones: detectar *sustancias moleculares* y *cuantificarlas*.

Los temas 9 y 10 se dedican a las *técnicas electroquímicas*, cuyos fundamentos son radicalmente distintos a los de las anteriores. Consisten en sacar partido analítico de la relación entre *química y electricidad*. Se trata de la **potenciometría**, la **electrogravimetría**, la **culombimetría**, la **voltamperometría** y la **conductimetría**.

El tema 11 recoge dos familias de técnicas muy especiales: las **radioquímicas** (de gran interés en medio ambiente) y las **térmicas**, menos aplicadas pero imprescindibles en estudios específicos relacionados con el *calor* y la *temperatura*. Además, se ha querido hacer una *revisión introductoria* a los **métodos automáticos de análisis**, que son los que se emplean en los laboratorios para *analizar rutinariamente muchas muestras de una vez* y, en el medio (*in situ*), para monitorizar un sistema con *poca intervención humana*.

Finalmente, el tema 12 está dedicado a las técnicas de separación (**cromatografía y electroforesis**). Puede considerarse el tema más importante de todos porque las técnicas cromatográficas requieren del concurso de todas las demás explicadas en los 11 temas anteriores para realizar el análisis completo de unas muestras tan complejas como las ambientales.

## *Estructura de los temas*

Cada tema arranca con un **GUION-ESQUEMA** que expone los contenidos que se van a desarrollar, el orden en que se va a hacer y la *jerarquía de los conceptos*. A continuación, una breve **INTRODUCCIÓN** resume el tema, lo contextualiza en la obra completa y lo relaciona con los demás. Ahí también se dan **RECOMENDACIONES DE ESTUDIO** para que el estudiante centre su

atención en los aspectos más importantes, y asimismo se enumeran los OBJETIVOS específicos del tema.

Seguidamente se desarrollan los CONTENIDOS. La exposición de las *técnicas instrumentales fisicoquímicas* requiere del dominio de un lenguaje y unos conceptos químicos y físicos que no todas las personas que estudian Ciencias Ambientales poseen. Se ha tratado, por ello, de presentar estos contenidos *imprescindibles* de forma sencilla y resumida, incluso amena en ocasiones, pero sin renunciar al *rigor científico* (aunque reduciendo el formulismo matemático al estrictamente necesario). En cada tema, una vez puestas estas bases teóricas se pasa a *las aplicaciones* y, en particular, a las *ambientales*. Para la mejor comprensión de los contenidos se han incluido más de 250 *figuras, esquemas y tablas*, buena parte de elaboración propia o adaptados.

Todos los temas se cierran con una pequeña lista de LIBROS recomendados por si se quiere profundizar en aspectos concretos. (Además, en la página *web* de este manual, [tfqma.wordpress.com](http://tfqma.wordpress.com), se ofrecen enlaces a sitios de interés relacionados con las *técnicas instrumentales en medio ambiente*, así como *calculadoras en línea* y *software específico*). Sigue una relación de PALABRAS CLAVE cuyo objetivo es resaltar los conceptos que se deberían tener claros antes de abordar el siguiente tema.

Para afianzar el aprendizaje y comprobar los conocimientos adquiridos se proponen después de cada tema unas ACTIVIDADES y unos EJERCICIOS DE AUTOEVALUACIÓN, tanto en forma de preguntas objetivas como de *problemas numéricos*. Algunas actividades son sencillos experimentos “caseros” al alcance de todos. Al final del libro se pueden encontrar las SOLUCIONES DE LOS EJERCICIOS DE AUTOEVALUACIÓN Y COMENTARIOS A LAS ACTIVIDADES.

Completan este volumen la BIBLIOGRAFÍA empleada, incluidas las fuentes de las figuras y tablas, así como un GLOSARIO de términos fisicoquímicos para una consulta rápida.

### *Consejos para el estudio*

El estudiante comprobará que este libro contiene muchos detalles sobre la *aplicación práctica* (es decir, en el laboratorio) de las *técnicas instrumentales fisicoquímicas*. Su inclusión tiene como objeto que se perciba la *complejidad* de estas técnicas y la gran cantidad de factores que hay que tener en cuenta cuando se aplican. *No es necesario que se memoricen* todos los aspectos concretos, pero sí que se reflexione críticamente sobre ellos. Si en algún momento de su carrera profesional el futuro ambientólogo ha de usar los instrumentos descritos, debe recordar que, aunque la mayoría se ponen en marcha “pulsando un botón”, su funcionamiento interno es complejo y hay que conocerlo para detectar posibles fallos y entender sus limitaciones.

Es fundamental que el estudiante dedique especial atención a los *aspectos aplicados de las técnicas*, también *sin necesidad de memorizarlos*, y lo mismo a los contenidos puramente teóricos. Es imprescindible que al terminar el estudio de cada tema sepa *a qué tipo de muestras se aplica cada técnica y cuáles son sus ventajas y limitaciones*; qué partido se puede sacar de cada una de ellas en estudios ambientales. Lo que se pretende, en definitiva, es que el futuro ambientólogo adquiera una *base crítica* para poder *valorar la significación* de los resultados del análisis fisicoquímico de una muestra ambiental obtenidos en un laboratorio.

JOSÉ M<sup>a</sup> GAVIRA VALLEJO  
ANTONIO HERNANZ GISMERO