



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Caracterización de la MOS mediante el uso de la
espectroscopia de infrarrojo y análisis multivariado para la
reconstrucción de la línea de árboles

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

Licenciado en Ciencias de la Tierra

PRESENTA:

Andrés Mendoza Frías



TUTOR

Dr. Arturo Sánchez González

Ciudad Universitaria, CD. MX, 2023



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1. Datos del alumno

Andrés
Mendoza
Frías
55 29 59 59 30
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Ciencias de la Tierra
309170042

2. Datos del tutor

Dr.
Arturo
Sánchez
González

3. Datos del sinodal 1

Dra.
Christina Désirée
Siebe
Grabach

4. Datos del sinodal 2

Dra.
Ruth Selene
Fuentes
García

5. Datos del sinodal 3

Dr.
Víctor Manuel
Peña
Ramírez

6. Datos del sinodal 4

Dr.
Harry
Alvarez
Ospina

7. Datos del trabajo escrito.

Caracterización de la MOS mediante el uso de espectroscopia de infrarrojo y análisis multivariado para la reconstrucción de la línea de árboles

91 p
2023

Agradezco

A la Universidad Nacional Autónoma de México por la formación brindada a lo largo de mis estudios.

Al Dr. Arturo Sánchez González por el conocimiento y enseñanzas compartidas. Por el tiempo invertido en la realización de este trabajo y la paciencia durante el proceso.

A la Dra. Christina Siebe por todo el apoyo brindado durante mi estancia en el laboratorio de Edafología, pero sobre todo por la pasión con la que comparte su conocimiento y amor por el suelo.

A la Dra. Ruth Fuentes por su apoyo y ayuda en la parte estadística y por siempre responder mis dudas en este rubro.

Al Dr. Víctor Peña por las valiosas aportaciones y comentarios para mejorar este trabajo.

Al Dr. Harry Alvarez por la confianza y apoyo brindado en diferentes momentos. Siempre le estaré agradecido.

A la M. en C. Kumiko Shimada y a Lucero Cabrera, por la ayuda proporcionada en el laboratorio.

A la M. Isabel Mejía por haberme dado la oportunidad de colaborar y aprender de grandísimas personas. A los Dres. Jorge Cruz, Adriana Melendez, Martha Leyte y Sara Cruz por enseñarme tanto y por los consejos dados. Al M. en C Edgar Bonilla por ser el mejor compañero de trabajo y por su amistad.

A mis amigos que Ciencias de la Tierra me dio, por tantas experiencias compartidas y por tantos momentos inolvidables. Amigos que llevaré para toda la vida. Gracias Amanda, Monchis, Lucy, Andrea, Aura, Itzayani, Héctor.

A Mariana y Jorge que son los mejores amigos que la vida me pudo dar. Gracias por ser cómplices, por estar siempre ahí. Con ustedes la vida es mejor.

A mis hermanitos. A Alex por siempre cuidarme y protegerme. A Henry por enseñarme tantas cosas de la vida.

A mi mamá por ser día a día un ejemplo para mí. Por su apoyo incondicional para mí y mis hermanos. Por siempre darme todo y más. Este logro es tuyo también. Gracias por tu amor y cariño.

Resumen

La vegetación determina la calidad de la materia orgánica del suelo (MOS), la cual a su vez puede ser caracterizada a través de espectroscopía de infrarrojo. En las sierras del centro de México la vegetación se distribuye en función de la altitud, la cual a su vez determina las condiciones climáticas. En la actualidad la línea de árboles se encuentra a los 4,000 m, pero hace 30,000 años, al final de la última glaciación, ésta se ubicaba alrededor de los 3,000 m. Por encima de la línea de árboles se establece un pastizal alpino, mientras que por debajo de ésta dominan bosques de pino y oyamel. En este trabajo nos planteamos la hipótesis de que los espectros de la MOS originada bajo vegetación de bosque serán diferentes a los de la MOS originada bajo cobertura de pastizal alpino, y que, por lo tanto, la MOS de suelos volcánicos sepultados puede indicar el tipo de vegetación que prevalecía en el sitio al momento de su formación.

El objetivo de este trabajo fue analizar el tipo de vegetación que dio origen a la MOS en horizontes, que hoy se encuentran sepultados, de una cronosecuencia de suelos con edades entre los 1,800 y 30,000 años ubicados a latitudes entre 3,000 y 3,200 m en la Sierra del Chichinautzin, con la finalidad de reconstruir la migración de la línea de árboles en la transición del Pleistoceno al Holoceno. Para ello se colectaron muestras de suelos superficiales de diferentes sitios dentro de la Faja Volcánica Transmexicana con vegetación actual de bosque o pastizal alpino, las cuales se compararon con las muestras de suelos sepultados de la cronosecuencia de la Sierra Chichinautzin.

Las muestras de suelo se analizaron por medio de espectroscopía de infrarrojo por Transformada de Fourier (FTIR), análisis estadístico multivariado (Componentes Principales) y diferentes clasificaciones no supervisadas (Clasificación basada en Modelos y conglomerados). Con la información obtenida se construyó un modelo basado en muestras de horizontes superficiales con

vegetación correspondiente a bosque y pastizal alpino para la reconstrucción de la línea de árboles dentro de la cuenca del Valle de México.

En el análisis de componentes principales (ACP) se encontraron algunas bandas características de cada tipo de vegetación, las cuales pueden ser de utilidad para la identificación del origen de la MOS desde el espectro de FTIR.

Las coordenadas del ACP y la clasificación basada en modelos mostraron una clara separación entre las vegetaciones estudiadas. También se distinguieron grupos en función de la edad de las muestras de bosque dentro de la cronosecuencia analizada. Con el modelo construido se determinó la probabilidad de cada muestra sepultada de pertenecer a cada uno de los grupos formados en la clasificación basada en modelos.

Las probabilidades obtenidas para cada uno de los horizontes enterrados pertenecientes a la cronosecuencia sugieren que la MOS tiene un origen a partir de bosques, predominantemente, indicando que la línea de árboles no descendió hasta los 3,200 m en la Sierra Chichinautzin. Sin embargo, se encontró una posible mayor abundancia de pastos en las muestras de mayor edad sin que este tipo de vegetación haya sido dominante.

Se concluye que el tipo de vegetación dominante durante los últimos 30,000 años dentro del área de estudio ha sido de bosque con una posible mayor abundancia de pastos en las muestras con edades cercanas a los 30,000 años.

Abstract

Vegetation determines soil organic matter (SOM) quality, which in turn can be characterized by infrared spectroscopy. In the mountains of Central Mexico vegetation changes with altitude, which in turn determines climate conditions. Currently, the tree line is located at 4,000 m, however, 30,000 years ago at the

end of the last glaciation, the tree line was supposedly at much lower altitude (ca. 3000 m). Above the tree line, alpine grassland is established, while below the tree line pine and fir forests prevail. Here we hypothesize that soil organic matter spectra will differ at sites covered by pine and fir forest from those covered by grassland, and that therefore the SOM of buried volcanic ash soils could indicate the prevailing vegetation type during its formation.

The objective of this work was to analyze the type of vegetation that originated the SOM buried horizons, of a soil chronosequence with ages between 1,800 and 30,000 years located between 3,000 and 3,200 m altitude in the Sierra Chichinautzin, with the aim to reconstruct tree line migration during the transition between the late Pleistocene and the Holocene. Surface soil samples were collected at different sites along the central part of the Transmexican Volcanic Belt covered by either pine - fir forests or grasslands, which were then compared with buried Ah horizon samples from the chronosequence of the Sierra Chichinautzin.

The samples were analyzed by Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR), multivariate statistical analysis (Principal Components) and different unsupervised classifications (Model Based Classification and clustering techniques). With the obtained data we constructed a model based on superficial horizons covered with forest and alpine grassland which was then used for the reconstruction of the tree line within the Sierra del Chichinautzin.

The principal component analysis (PCA) showed characteristic bands of each type of vegetation, which are useful for identifying the origin of the SOM from the FTIR spectrum. The PCA coordinates and the Model-Based Classification showed a clear separation between the studied vegetations. Groups were also distinguished based on the age of the forest samples within the analyzed chronosequence. With the model, the probability of each buried sample to belong to each of the groups formed in the Model-Based Classification was determined.

The calculated probabilities for each of the buried horizons of the chronosequence suggest that the SOM in them has a forest origin. We assume that the tree line did not descend lower than 3200 m, from where the samples were obtained. However, a greater abundance of grasses was found in the older samples without being grassland the dominating vegetation.

We conclude that the dominant vegetation during the last 30,000 years within the study area has been forest with a possible greater abundance of grasses in the samples with ages close to 30,000 years.

Índice general.

1. Introducción	1
2. Marco teórico	7
2.1 Memoria del suelo.....	7
2.2 Proceso de neoformación de minerales.....	7
2.2.1 Formación de suelos volcánicos.....	7
2.2.1.1 Etapa iónico-coloidal.....	8
2.2.1.2 Etapa no cristalina-paracristalina.....	9
2.2.1.3 Etapa cristalina.....	9
2.3 Proceso de acumulación y transformación de materia orgánica en el suelo (MOS).....	10
2.3.1 Humificación y melanización del suelo.....	10
2.4 Composición de la materia orgánica del suelo.....	11
2.4.1 Origen de la MOS.....	11
2.4.2 Proporción de lignina, celulosa y hemicelulosa en las vegetaciones estudiadas: bosque y pastizal.....	11
2.5 La materia orgánica como elemento de memoria del suelo.....	12
2.6 Ecotono o línea de árboles.....	13
2.7 Uso de la espectroscopía de infrarrojo (FTIR) para extraer información de mezclas complejas acopladas al análisis de componentes principales.....	14
3. Objetivo e hipótesis	18
3.1 Objetivo general.....	18
3.1.1 Objetivos particulares.....	18
3.2 Hipótesis.....	18
4. Métodos y análisis estadístico	20
4.1 Zona de estudio.....	20
4.1.1 Faja volcánica Transmexicana.....	20
4.1.2 Sierra de Chichinautzin.....	20
4.1.3 Cofre de Perote.....	21
4.1.4 Parque Nacional Iztacihuátl-Popocatepetl.....	22
4.1.5 Parque Ecológico de la CDMX.....	22
4.2 Obtención de muestras.....	22
4.3 Preparación de las muestras para el modelo.....	24
4.4 Análisis con Espectroscopía de infrarrojo por Transformada de Fourier.....	25
4.5 Depuración de base de datos.....	25
4.6 Análisis estadístico.....	25
4.6.1 Análisis de componentes principales.....	25
4.6.2 Clusters.....	26
4.7 Clasificación basada en modelos.....	26
4.7.1 Construcción del modelo.....	26
4.8 Muestras Problema.....	28
4.9 Cálculo de Probabilidades.....	28

5. Resultados	30
5.1 FTIR-espectros.....	30
5.2 ACP.....	32
5.2.1 ACP-varianza.....	33
5.2.2 ACP-coordenadas.....	34
5.2.3 ACP-cargas.....	38
5.3 Clasificación basada en modelos.....	40
5.4 Muestras problema.....	45
5.4.1 Coordenadas muestras problema.....	49
5.5 Cálculo de probabilidades.....	51
5.6 Cronosecuencia.....	55
6. Discusión	56
6.1 Espectros FTIR.....	56
6.2 Coordenadas.....	58
6.3 Muestras problema.....	64
6.3.1 Muestras control.....	64
6.4 Probabilidades.....	65
6.4.1 Muestras problema dentro de la cronosecuencia de Peña-Ramírez,2013.....	65
6.4.2 Muestras control.....	66
6.5 Acumulación de compuestos derivados de lignina	66
6.6 Reconstrucción de la línea de árboles.....	67
7. Conclusiones	62
8. Bibliografía	64
9. Anexos	76

Índice de Figuras

1	Horizontes y espesores que conforman la cronosecuencia.....	24
2	Diagrama de flujo del procedimiento empleado.	27
3	Espectros IR muestras de suelos con cobertura de bosque por edad y suelos con pastizal, horizontes Ah.....	28
4	Porcentaje de varianza acumulada por componente.....	33
5	Coordenadas CP 1 vs CP2.	36
6	Coordenadas CP 3 vs CP2.	37
7	Cargas asociadas a los diferentes componentes principales.....	39
8	Clasificación basada en modelos (CP 1 vs CP 2).....	41
9	Clasificación basada en modelos (CP 3 vs CP 2).....	42
10	Grupo asignado por la CBM a las muestras de la cronosecuencia dentro del modelo.....	45
11	Espectros Infrarrojo de las muestras problemas horizontes Ah enterrados, dentro de la cronosecuencia de Peña-Ramírez, 2013....	47
12	Muestras control correspondientes horizontes Ap provenientes de una parcela de cultivo vegetación de cultivo (morado) y a matorral xerófilo (rosa).....	48
13	Coordenadas obtenidas a partir del ACP de las muestras problema.	49
14	Coordenadas muestras problema y CBM.....	50
15	Vegetación asociada por la CBM a las muestras problema dentro de la cronosecuencia analizada.....	51
16	Localización de las muestras problema en los CP 2 y 3 y su probabilidad de pertenecer a un grupo diferente al asignado por la CBM.....	52
17	Localización de las muestras problema en los CP 2 y 3 y su probabilidad de pertenecer a un grupo diferente al asignado por la CBM.....	53

18	Bandas de absorción asociados a diferentes moléculas, lignina, celulosa, hemicelulosa, polisacáridos y carbohidratos.....	57
19	Espectro de referencia con picos asociados a lignina y celulosa.	57
20	Cluster rutina Ward.....	86
21	Grupos rutina Ward.....	87
22	Cluster rutina Complete.....	87
23	Grupos rutina Complete.....	88
24	Cluster rutina Single.....	88
25	Grupos rutina Single.....	89
26	Cluster rutina Average.....	89
27	Grupos rutina Average.....	90

Índice de tablas

1	Muestras utilizadas para la construcción del modelo.....	23
2	Intensidad de las señales por grupo de muestras.....	32
3	Probabilidad de cada muestra problema.....	54
4	Características muestras problema.....	55
5	Bandas de interés asociadas a las biomoléculas de interés por CP...	61
6	Cargas relevantes e intensidades por CP.....	83
7	Similitud entre rutinas divisivas y los grupos formados por la CBM.....	91

Capítulo 1

Introducción

Los suelos son cuerpos naturales formados en la superficie del planeta; dentro de ellos se encuentra tanto material orgánico como inorgánico (Osman, 2012). transformados a través de procesos naturales de intemperismo y descomposición de tejidos vegetales y animales muertos, también conocido como pedogénesis. Estar expuestos en la superficie y anclados en el paisaje le confieren algunas cualidades; como la de registrar la historia de del paisaje a través de sus diferentes horizontes y sus propiedades (Shrestha & Lal, 2010). Targulian & Goryachkin (2004) proponen el concepto de memoria del suelo, ya que estos sistemas naturales son capaces de almacenar información sobre los factores ambientales y los procesos que ocurrieron durante la pedogenesis. Debido a esta memoria, los suelos pueden ser *proxis* para reconstruir paleoclimas in situ a través de la identificación de neoformaciones minerales producto de condiciones húmedas o secas, respectivamente (Targulian & Goryachkin, 2004). En paisajes afectados por actividad volcánica recurrente se encuentran además suelos sepultados, cuyos horizontes reflejan rasgos característicos del clima imperante en la zona durante su formación, es decir el periodo de estabilidad entre eventos eruptivos.

Cambios en el clima afectan la distribución de la vegetación, lo que a su vez tiene implicaciones importantes para el balance de carbono de la vegetación global. La reconstrucción de la distribución de la vegetación bajo escenarios climáticos del pasado es esencial para comprender la respuesta de la distribución de la vegetación a los cambios climáticos futuros (S. Wang *et al.*, 2017) y con ello forma parte medular de la ecología del cambio climático.

Una de las propiedades que se utiliza del suelo para monitorear los cambios en la vegetación es la cantidad de materia orgánica del suelo (MOS). La MOS es

considerada una mezcla de moléculas orgánicas (Kelleher & Simpson, 2006) resultantes de la descomposición de tejidos vegetales y animales por parte de los microorganismos del suelo (Brady *et al.*, 2008) siendo la biomasa vegetal el principal aporte a la MOS (Kögel-Knabner, 2002). A pesar de que la MOS sólo ocupa entre el 2 % y el 8 % de los suelos, tiene un papel importante en las propiedades físicas, químicas y biológicas del suelo. Las características de esta mezcla compleja, dependen de diversos factores entre los que se encuentran la vegetación y las condiciones vegetales imperantes (Vancampenhout *et al.*, 2008).

La MOS es una mezcla compleja; una fracción de ella es relativamente inestable en tiempos cortos, mientras que otra fracción tiende a ser persistente en el suelo en escalas de tiempo de milenios (Kleber, 2010; Schmidt *et al.*, 2011). Debido a esta persistencia, moléculas de la fracción persistente o recalcitrante de la MOS deberían estar presentes dentro de los horizontes analizados. Los residuos vegetales del suelo están compuestos por mezclas complejas de componentes orgánicos, principalmente polisacáridos (celulosa, hemicelulosa, almidón) y en menor proporción lignina, proteínas, lípidos y ceras (Lützow *et al.*, 2006). Algunos compuestos como la lignina, ceras y lípidos se consideran como menos biodegradables debido a su estructura. La abundancia de estos componentes varía entre las diferentes especies de planta (Kögel-Knabner, 2002), siendo mayor el contenido de lignina en los bosques (debido a su tamaño) respecto a pastizales alpinos, así como el contenido de ceras y lípidos que se encuentra presente en las acículas de los pinos. Esta cualidad podría ser utilizada para reconstruir la vegetación que existió en un periodo determinado del pasado de un sitio o paisaje al estudiar los horizontes sepultados, ayudando a entender y determinar la dinámica de la vegetación antes cambios climáticos en la historia de algún sitio. Los suelos desarrollados dentro de un paisaje volcánico (como el área de estudio) ofrecen el objeto de estudio idóneo para explotar a la materia orgánica del suelo actual y compararlo con la MOS de los suelos sepultados, para tratar de encontrar la vegetación bajo la cual se desarrollaron suelos enterrados.

En la zona central de la Faja Volcánica Transmexicana, región donde se localiza la Sierra del Chichinautzin, se reportan 6 tipos de vegetación: pastizal, bosque de pino, bosque de oyamel, bosque de encinos, bosque mesófilo y matorral xerófilo (Rzedowski, 1991) los cuales se distribuyen en función de la altitud de la siguiente manera: por encima del límite arbóreo se encuentran el pastizal alpino como cobertura dominante, el límite de arbóreo se encuentra representado por bosques de *Pinus hartwegii*, entre los 3,000 y 3,800 m dominan los bosques de *Abies* (Oyamel), por debajo de los 3,000 m y hasta los 2,800 m se encuentran los bosques de pino encino, los bosques mesófilos se desarrollan entre los 2,800 y 2,000 m y por último el matorral entre los 2,500 y 2,000 m.

El último periodo glacial ocurrió hace 110,000 años en el planeta y terminó hace 10 000 años aproximadamente. En el centro de México las elevaciones mayores a 3200 m se encontraron temporalmente cubiertas por hielo hace 25 000 años (White & Valastro, 1984). Desde inicios del Holoceno los glaciares se están retrayendo y en la actualidad sólo elevaciones superiores a 5,000 m se encuentran cubiertas por hielo permanente (Caballero *et al.*, 2010). Igualmente, el límite arbóreo se ha ido desplazando a lo largo de los últimos 20 milenios. De acuerdo con Caballero *et al.*, (2010) en la actualidad el límite arbóreo en la actualidad se sitúa en los 4,000 m, sin embargo, hace aproximadamente 22,000 años se encontraba a los 3,000 m presentando un retroceso de 1,000 m respecto a la actualidad. Considerando que el límite arbóreo ha estado migrando se espera que en horizontes de suelo con edades comprendidas dentro de este periodo se encuentren rastros de transiciones de vegetación derivadas del aumento gradual de la temperatura a lo largo del gradiente altitudinal. Además, se espera que los rasgos característicos de la cobertura que prevaleció en superficie se encuentren preservados dentro de la MOS en los horizontes que hoy se encuentran sepultados.

En el presente trabajo se pretende determinar la vegetación en horizontes superficiales que hoy se encuentran sepultados dentro de la cronosecuencia de

suelos analizada por Peña-Ramírez (2013). Los sitios a estudiar dentro de la cronosecuencia se localizan entre los 3100 y 3200 m, donde las especies dominantes arbóreas son *Pinus montezumae* y *Abies religiosa* (Peña-Ramírez, 2013) mientras que las especies herbáceas en Cofré de Perote y el Parque Nacional Iztaccíhuatl-Popocatepetl son *Muhlenbergia macroura*, *Calamagrostis tolucensis*, *Festuca tolucensis*, *Festuca livida* y *Arenaria bryoides* (Almeida-Lenero *et al.*, 2004; Rzedowski, 2006; Semarnat, 2015) y *Muhlenbergia robusta* en el Ajusco (Siebe *et al.*, 2016). La hipótesis del trabajo postula por lo tanto que analizar a detalle la materia orgánica del suelo superficial actual, así como de horizontes ricos en materia orgánica sepultados por caídas de tefra ayudará a reconstruir los cambios en la cobertura vegetal ante los cambios climáticos. El ecotono marca la transición entre dos ecosistemas adjuntos; este límite de transición es dinámico y responde principalmente a los cambios de temperatura. En el límite superior del bosque, en el ecotono bosque-pastizal alpino existe evidencia del avance del límite arbóreo en respuesta al aumento de temperatura (Astudillo-Sánchez *et al.*, 2017)

Existen diferentes técnicas que nos permiten analizar la materia orgánica del suelo. Entre ellas podemos encontrar técnicas que van desde cuantificar su concentración (Morona *et al.*, 2017), el estudio de sus propiedades físicas y químicas a través de análisis bromatológico (Zambrano B *et al.*, 2014), análisis de ácidos húmicos (Ciarkowska *et al.*, 2017; Davis *et al.*, 1999), relación isotópica (Kayler *et al.*, 2011), el estudio de los enlaces de las moléculas presentes en la materia orgánica del suelo mediante técnicas como la espectroscopia de infrarrojo, Raman y NMR (Teong *et al.*, 2016; Warren & Ziegler, 2017; Wiesheu *et al.*, 2018). La espectroscopia de infrarrojo (FTIR) es una técnica detallada que permite analizar diversas propiedades de la materia a partir de la interacción de la radiación infrarroja con la muestra. La utilidad de esta técnica se debe a que las distintas estructuras químicas o moléculas producen diferentes huellas espectrales. Los espectros, resultado de este análisis, están conformados por miles de puntos que son complejos de analizar; debido a que muestran la

información de una mezcla compleja de compuestos orgánicos. Dentro de un contexto de la identificación de compuestos puros, es una herramienta útil por el nivel de detalle proporcionado. Sin embargo, dentro del contexto del análisis de la materia orgánica del suelo resulta complejo por la mezcla de compuestos que la conforman. Una alternativa útil para abordar este problema es incluir técnicas de análisis multivariado para procesar la información contenida en todo el espectro. El propósito de las técnicas de análisis multivariado es concentrar la información en un número reducido de variables.

Estas técnicas en conjunto se han empleado en estudios de índole diversa, por ejemplo, en el estudio de la calidad del petróleo (Abbas *et al.*, 2012), la discriminación de materiales con diferentes especímenes biológicos de peligro para el hombre tales como bacterias (Bombalska *et al.*, 2011), y el estudio de películas policristalinas de carburo de silicio (Broderick *et al.*, 2012). El suelo es una matriz que de igual manera ha sido explorada mediante estas técnicas; Haberhauer (2000) estudió los cambios en la MOS debidos a la deforestación en suelos tropicales, mientras que Elliot (2007) apoyado en un Análisis de Componentes Principales (ACP) realizó la diferenciación entre suelos perturbados y no perturbados.

Existen diversos trabajos que han acoplado estas dos técnicas para el estudio de la MOS; Sánchez-González *et al.* (2015) observaron cambios en las macromoléculas presentes en la MOS de Vertisoles en función del tiempo de riego y la profundidad. Pilatowski (2015) estudió la composición y variabilidad de la MOS en suelos agrícolas bajo riego con agua residual. Beattie & Esmonde-White (2021) realizaron un estudio relacionando la FTIR con el uso de el Análisis de Componentes Principales (ACP) para el análisis de horizontes de suelo. Por lo anterior, el presente trabajo se enfocó en la construcción de un modelo de identificación de la vegetación que dio origen a la MOS analizando los horizontes superficiales con vegetación conocida (pastizal o bosque) mediante FTIR acoplado a ACP. El modelo se usó después para reconstruir la vegetación que

prevalecía en la superficie antes de que los suelos quedaran sepultados por los diferentes eventos eruptivos que se lograron identificar la línea de árboles en la cronosecuencia obtenida en la Sierra de Chichinautzin por Peña-Ramírez (2013).

Marco teórico.

2.1. Memoria del suelo

Los suelos tienen la capacidad para almacenar información sobre los factores ambientales y los procesos que han estado actuando durante un periodo de pedogénesis (Targulian & Goryachkin, 2004). Rasgos particulares de los suelos frecuentemente son la evidencia única de las condiciones climáticas locales que prevalecieron durante un periodo específico dentro del tiempo geológico (Catt, 1991). La memoria del suelo es la capacidad del complejo sistema multifásico del suelo para archivar los fenómenos ambientales que actuaron *in situ* durante el proceso de pedogénesis en cada punto de la superficie del planeta (Targulian & Goryachkin, 2004). Por ello, que los suelos funcionan como indicadores de cambios climáticos en el pasado. Los principales mecanismos de memoria del suelo y formación de registro son aquellos conjuntos de procesos pedogenéticos que generan los productos de la fase sólida y los rasgos dentro del sistema de suelo multifásico (Targulian & Bronnikova, 2019).

A diferencia del registro obtenido mediante sedimentos, la memoria del suelo se forma *in situ* (Targulian & Goryachkin, 2004) por lo que el registro que guarda el suelo, durante un periodo específico de pedogénesis, tendrá una mayor resolución espacial respecto al registro sedimentario.

2.2 Proceso de Neoformación de minerales.

2.2.1 Formación de suelos volcánicos.

Los Andosoles se forman predominantemente a partir de depósitos piroclásticos de caída, debido a esto, están confinados a las zonas volcánicas en el mundo. Dentro de los depósitos piroclásticos figuran los de pómez, ceniza volcánica

entre otras, además de flujos piroclásticos como lahares y lavas (Peña-Ramírez, 2013) entre otros . El prefijo ando deriva del japonés y significa “suelo oscuro”, por lo que los Andosoles se caracterizan por presentar colores oscuros. La composición mineralógica de estos suelos está dominada por arcillas de bajo orden estructural; por ejemplo, el alofano y la imogolita, o bien por un alto contenido de complejos órgano metálicos de hierro y aluminio (Mizota, C and Van Reeuwijk, 1989).

La relevancia de las cenizas como material parental formador de suelos radica en el tamaño fino de sus partículas, su naturaleza vidriosa, alta porosidad y permeabilidad (Peña-Ramírez *et al.*, 2015), siendo esta propiedad vítrea la que le confiere baja resistencia al intemperismo.

La concentración promedio de materia orgánica presente en estos suelos se encuentra alrededor del 8%, sin embargo, puede llegar al 30 % en horizontes orgánicos (Hari Eswaran *et al.*, 1993). Este tipo de suelos presentan propiedades vítricas o ándicas (IUSS, 2008); en función del avance de la pedogénesis se distinguen se distinguen tres etapas de intemperismo de la pedogénesis que son: la iónico coloidal, la no cristalina-paracristalina y la cristalina (Besoain, 1969)

2.2.1.1 Etapa iónico-coloidal.

Esta etapa se presenta a los pocos años de que la ceniza se ha sido depositada; durante esta etapa se incluyen los siguientes procesos: hidratación del vidrio, la pérdida de cationes mono y divalentes y pérdida de sílice (Polinov, 1937, como se citó en Peña-Ramírez, 2013). La intemperización inicia con la hidratación e hidrolización de las estructuras vítreas, feldespatos y minerales primarios cambiando las uniones de O por uniones OH, provocando un debilitamiento estructural favoreciendo la intemperización.

La intensa intemperización origina un sistema iónico de composición variable, favoreciendo el desarrollo de un sistema iónico coloidal formado por polímeros tridimensionales de Si, Al y Fe (Besoain, 1974).

2.2.1.2 Etapa no cristalina-paracristalina.

Durante esta etapa se forman arcillas minerales de bajo orden estructural, como el alofano y la imogolita, las cuales están formadas por aluminosilicatos hidratados que se caracterizan por la presencia de enlaces Si-O-Al. Además de estas dos arcillas, es común la formación de opalina sílica en esta etapa.

En esta etapa el aluminio liberado por el intemperismo del material parental es retenido por la materia orgánica, estabilizándolo al formar compuestos órgano metálicos también conocidos como complejos humus-metales estables. En los horizontes A de los Andosoles, los complejos humus-metal de Al, son la forma dominante del Al activo, en contraparte, los complejos de Fe son escasos. (Mizota, & Van Reeuwijk, 1989). El carbono orgánico contenido en estos complejos constituye una reserva de C altamente estable, la cual está protegida de la biodegradación y de la mineralización. El C se acumula conforme se forman este tipo de complejos.

2.2.1.3 Etapa cristalina.

En esta etapa, el alofano puede evolucionar hacia haloisita o caolinita mediante el reemplazo de grupos OH por O y adicionando más tetraedros de SiO₄ por condensación como consecuencia de la deshidroxilación (Chadwick & Chorover, 2001). La presencia de haloisita y metahaloisita es frecuente en suelos derivados de cenizas volcánicas con estados de intemperización avanzados. (Besoain, 1974).

La persistencia de las arcillas cristalinas puede perdurar desde decenas hasta miles de siglos. Por lo tanto, la evolución mineralógica de las cenizas volcánicas puede explicarse mediante la siguiente secuencia: alofano, imogolita, haloisita, metahaloisita hasta formas más estables tales como la caolinita. (Besoain, 1985)

2.3 Proceso Acumulación y transformación de materia orgánica en el suelo.

2.3.1 Humificación y melanización del suelo.

La materia orgánica es un componente esencial en los suelos, la originan residuos de plantas y animales en varias etapas de descomposición. Estos residuos están compuestos de diversas moléculas entre las que se encuentran la lignina, la celulosa, la hemicelulosa, las proteínas, las ceras y los lípidos. Estas moléculas presentan diferentes tasas de descomposición en función de su complejidad, siendo la lignina la molécula más resistente a este proceso, con lo cual el contenido de lignina y sus productos de transformación aumenta en los suelos conforme se descompone la materia orgánica presente (Osman, 2012). Este proceso se conoce como formación de humus o humificación y toma cientos a miles de años dado que la tasa de descomposición disminuye con el tiempo. El humus conforma entre el 40 al 60% de la MOS y se puede definir como materia orgánica amorfa y coloidal de color negro o marrón compuesta de complejos orgánicos estables formados a partir de los productos de la descomposición y resíntesis de los residuos (Brady *et al.*, 2008). Debido a la constante adición, descomposición y acumulación de grandes cantidades de materia orgánica en el perfil de suelo se produce un proceso de oscurecimiento conocido como melanización. (H Eswaran & Reich, 2005).

2.4 Composición de la materia orgánica del suelo (MOS)

2.4.1 Origen de la MOS

La materia orgánica del suelo (MOS) representa una acumulación de residuos vegetales y animales parcialmente descompuestos y parcialmente sintetizados. (Brady *et al.*, 2008). La cantidad y composición de los residuos de plantas son factores esenciales que controlan la formación de la MOS (Scholes *et al.*, 1997). Siendo la biomasa de las plantas la principal fuente de residuos de la MOS (Gleixner *et al.*, 2002; Kögel-Knabner, 2002), dicha biomasa contiene diferentes polímeros entre ellos la celulosa, lignina y proteínas. La composición de esta mezcla está influenciada por una serie de factores que incluyen la vegetación, decaimiento microbiano y las condiciones ambientales (Vancampenhout *et al.*, 2008). La materia orgánica tiene diferentes cualidades debido a su origen y la cantidad de compuestos orgánicos que son característicos del sitio de donde se acumulan.

2.4.2 Proporción de lignina, celulosa y hemicelulosa en las vegetaciones estudiadas: bosque y pastizal.

La lignina, la celulosa y la hemicelulosa son los tres polímeros fundamentales que constituyen las plantas. La proporción de cada una de estas tres moléculas varía dentro de los diferentes tipos de vegetación. De manera general, los residuos de plantas contienen 15-40 % de celulosa, 10-43% de hemicelulosa, 25%- 40% de lignina, 1-10 % de ceras y lípidos y 1-15% de proteínas.

Juneja *et al.* (2011) reportaron los siguientes contenidos de estos polímeros dentro de pastizales de diferentes zonas: lignina entre el 13.4% a 17.5%; celulosa entre 28.8% y 36.0% y de hemicelulosa se encontraron porcentajes que van del 17.9% al 24.7%. En contraparte en los árboles, (Sjöström, 1993) reporta contenidos de lignina cercanos al 25%, celulosa 45% y 25 % para hemicelulosa.

La lignina proporciona la estabilidad necesaria para que los árboles soporten su peso (Koch *et al.*, 2004), es por ello que los árboles al ser cuerpos de mayores dimensiones, contienen una mayor proporción de lignina respecto a los pastos. El humus contiene aproximadamente 45% de lignina, 35% de aminoácido, 4% de celulosa, 7% de hemicelulosa y un 3% de ceras y resinas (Osman, 2012). Las proporciones de estos polímeros en el humus es el reflejo de su proceso de degradación dentro del suelo.

2.5 La materia orgánica como elemento de memoria del suelo.

La MOS, a pesar de ser termodinámicamente inestable, tiende a ser persistente en el suelo debido a la influencia fisicoquímica y biológica del entorno (Schmidt *et al.*, 2011). Debido a la biodegradación, se presenta una preservación selectiva de biomoléculas (Van Bergen *et al.*, 1995), por lo que es de esperarse que rastros de estas biomoléculas se preserven en los horizontes de suelo. La lignina, la celulosa y la hemicelulosa principalmente, estas moléculas tienen diferentes tasas de degradación. La degradación de los residuos de las plantas depende en buena medida de la proporción de lignina y celulosa que contengan. La transformación de estas moléculas constituyen un paso esencial en el proceso de mineralización de compuestos orgánicos (Austin & Ballaré, 2010) y tiene un papel importante en el balance de carbono en los ecosistemas terrestres (Berg, 2014). La celulosa es el polímero y polisacárido más abundante dentro de los residuos de plantas. Por su parte la lignina está compuesta por un grupo complejo de polímeros cíclicos presente en la pared celular de las plantas. (Austin & Ballaré, 2010).

En conjunto la lignina y la celulosa controlan en gran medida el proceso de descomposición de los residuos en el suelo (Schwarz, 2001), siendo la lignina una molécula de alta resistencia a la degradación (Kögel-Knabner, 2002) y un componente recalcitrante presente en los residuos en descomposición en el suelo (Wang *et al.*, 2018).

2.6 Ecotono o línea de árboles

Los ecotonos son límites de transición confinados entre dos ecosistemas distintos cuya superposición da como resultado una comunidad ecológica única, estos son dinámicos e inestables en comparación con los ecosistemas vecinos y se caracterizan por un cambio en los factores estresantes abióticos (Longhurst, 2006). Los ecotonos pueden tener una gran influencia en los ecosistemas limítrofes y un cambio en estos indica cambios tanto locales como globales (Myster, 2012).

La dinámica de los ecotonos está controlada por varios factores abióticos, entre ellos, el clima (Myster, 2012). En este estudio, se abordó el estudio del ecotono existente entre los bosques y los pastizales alpinos presentes en la parte central de la Faja Volcánica Transmexicana. Este ecotono es altamente sensible a la variabilidad climática, ya que el desarrollo de los árboles en estas zonas se encuentra restringido por la temperatura (Kupfer & Cairns, 1996). La variación de temperatura modifica los procesos demográficos del ecotono y esto se traduce en cambios en la posición (altitud) de la zona de transición (Camarero *et al.*, 2017).

La línea de árboles es la frontera empleada para marcar el límite del hábitat en donde los árboles son capaces de crecer, siendo la temperatura el principal factor que controla el crecimiento y sostenimiento de los árboles en una región determinada (Myster, 2012); es por ello que la línea de árboles constituye una buena referencia para delimitar el ecotono entre la vegetación de bosque y pastizal alpino.

Debido a la sensibilidad del ecotono pastizal-bosque alpino, la determinación de esta región en horizontes sepultados puede constituir una herramienta interesante para el estudio de las condiciones climáticas existentes en el pasado.

Diversos estudios se han realizado para tratar de realizar la reconstrucción de las condiciones climáticas imperantes en la cuenca de México durante la última glaciación, fechada entre 26,500 a 20,000 años A.P. dentro del Pleistoceno Tardío (Clark 2009). Existen diferentes trabajos que han ayudado en la reconstrucción climática de la cuenca, entre los que destacan, el análisis polínico, que permite obtener información sobre la composición de la vegetación actual y pasada (Lozano, 1996) y el análisis de los registros glaciares que documentan episodios de extensión, estancamiento o regresión de estos cuerpos (White & Valastro, 1984), estudios de la megafauna pleistocénica (Ferrusquía-Villafranca *et al.*, 2010), entre otros.

2.7 Uso de la espectroscopia de infrarrojo (FTIR) para extraer información de mezclas complejas acoplada al análisis de componentes principales.

La espectroscopia de Infrarrojo (FTIR) permite el estudio de propiedades de interés de la materia mediante la interacción de la luz con la materia. Dicha información se recopila en datos espectrales los cuales suelen ser difíciles de interpretar. Estos espectros están constituidos por miles de puntos, dentro de los cuales se encuentran señales de poco interés, ruido e información altamente correlacionada con un proceso o propiedad de interés (Beattie & Esmonde-White, 2021). La información obtenida se genera por los enlaces químicos dentro de los compuestos orgánicos; el problema se complica ya que los diferentes grupos de moléculas que constituyen la materia orgánica del suelo tienen enlaces químicos (o segmentos de moléculas) similares. Las primeras aproximaciones para interpretar estos espectros se basaban en utilizar grupos funcionales claves (COOH, NH₂, C=C aromáticos, etc) para entender el comportamiento de la mezcla.

Diversos trabajos han empleado la FTIR para el análisis de una matriz tan compleja como lo es el suelo y en particular de la MOS. Ristori *et al.*, (1992) caracterizaron la MOS en 5 fracciones de diferentes tamaños dentro de Vertisoles encontrando que esta se encuentra concentrada en agregados de tamaño limo; asimismo la FTIR reveló la existencia de enlaces fuertes de hidrógeno entre la MOS y la fracción mineral del suelo. El empleo de esta técnica no se basa en el estudio del espectro IR completo, diversos trabajos se enfocan en el estudio de bandas características dentro de los espectros, por ejemplo, Davis *et al.*, (1999) identificaron la diferencia de absorción en la región de los $1,700\text{ cm}^{-1}$ de doce sustancias húmicas presentes en el suelo y Haberhauer & Gerzabek, (1999) evaluaron la descomposición de los detritos de bosques en el suelo mediante bandas específicas.

Zaccheo *et al.*, (2002) estudiaron las rutas de degradación de la MOS a partir de diferentes sustratos encontrando que las bandas de diferentes biomoléculas se sobrelapan dificultando el análisis de los espectros.

Dupuy & Douay, (2001) estudiaron la interacción entre metales y la MOS dentro de los espectros IR, encontrando variaciones en las bandas $1,670 - 1,690$ y $1,710\text{ cm}^{-1}$ en función de la concentración de Pb en suelos contaminados.

Con el avance en el procesamiento de datos y la necesidad de profundizar en la interpretación de estos espectros, se incorporaron técnicas de análisis multivariado. Esta técnica permite analizar todo el espectro y no solo pequeñas secciones de él con la finalidad de obtener la mayor cantidad de información posible del espectro. Debido a esto, en algunas ocasiones es necesario realizar una reducción de dimensiones para facilitar el análisis de los datos espectrales y para ello es necesario recurrir a técnicas y algoritmos matemáticos para lograr este fin, siendo el Análisis de Componentes Principales (ACP) una de estas técnicas.

La esencia de esta técnica consiste en la simplificación de los datos originales con una pérdida mínima de la descripción de la covarianza general que existe en los datos originales para la reducción de la dimensionalidad con la que se representan los datos (Gewers *et al.*, 2018) identificando aquellas variables que son más relevantes para explicar estas relaciones en los datos (Abdel-Fattah *et al.*, 2021). En resumen, esta técnica es un método para transformar las variables originales en una serie de variables nuevas no correlacionadas llamadas componentes principales (Jolliffe, 1993; Niu *et al.*, 2011).

El ACP acoplado a la FTIR se basa únicamente en la información contenida en los espectros, por lo que el modelo matemático dependerá de la naturaleza y estructura de los datos. El vínculo que guardan los espectros y el modelo construido permite una explicación espectroscópica concreta del ACP, por ejemplo las coordenadas (scores) que representan la concentración o peso; mientras que las cargas (loads) constituyen formas espectrales ocultas, repetidas y no correlacionadas que linealmente se combinan para generar los espectros observados (Beattie & Esmonde-White, 2021).

La FTIR en complemento con diferentes análisis estadísticos ha sido empleado de manera satisfactoria en diversos materiales y muestras; por ejemplo, Abbas *et al.*, (2012) emplearon la FTIR en conjunto con la regresión de mínimos cuadrados parciales para predecir diferentes parámetros que definen la calidad del petróleo crudo. La FTIR acoplada a diferentes análisis estadísticos ha sido empleada también a matrices de origen biológico Bombalska *et al.*, (2011) demostraron que mediante un análisis de conglomerados a los espectros de diferentes materiales biológicos es posible discriminar entre esporas de bacterias, formas vegetativas y hongos a pesar de que los espectros guarden semejanza entre sí, denotando que las pequeñas diferencias entre los espectros son suficientes para realizar esta discriminación. Naumann *et al.* (2010) mediante un análisis de conglomerados lograron realizar una discriminación eficiente entre

muestras que contenían raíces de avena y raíces de guisantes a partir de los espectros IR.

El ACP acoplado a la FTIR ha sido empleado para discriminar diferentes matrices. Un ejemplo de ello es el trabajo realizado por Cotrim (1999) quien demostró que esta técnica resultó efectiva para identificar el origen de la lignina a partir de muestras de caña de azúcar y eucalipto además de permitir monitorear los cambios estructurales de esta molécula. Haberhauer *et al.*, (2000) aplicaron estas técnicas a muestras de suelo con el fin de identificar el origen de la MOS. El estudio consistió en identificar si la MOS procedía de sitios no perturbados (bosque tropical) o sitios perturbados (pastizales) en suelos tropicales. Asimismo, demostró que los cambios más notorios debidos a la deforestación en la FTIR se dieron en las capas orgánicas de los suelos analizados y que la fracción mineral prácticamente no sufre cambios, lo cual nos indica que dicho análisis es sensible a cambios en la MOS.

Capítulo 3

Objetivos e hipótesis

3.1 Objetivo general

Desarrollar un modelo de vegetación utilizando FTIR como indicador del tipo de vegetación presente durante la formación de los suelos que hoy en día se encuentran sepultados por cenizas volcánicas.

3.1.1 Objetivos particulares

Asociar las diferentes bandas del espectro IR a las distintas coberturas vegetales estudiadas.

Determinar bandas útiles del espectro IR para la caracterización de coberturas vegetales.

Someter el modelo desarrollado al estudio de muestras de horizontes Ah sepultados para determinar la cobertura presente en superficie antes de quedar sepultados y correlacionar dicha cobertura con las condiciones climáticas.

Determinar si hubo un avance o retroceso en la línea de árboles dentro de la Sierra del Chichinautzin.

3.2 Hipótesis

La FTIR permitirá discriminar entre los distintos tipos de vegetación estudiados dada la diferencia en la MOS de los compuestos que la forman, produciendo

espectros con diferentes características. En conjunto con el ACP se podrá hacer la discriminación entre los tipos de vegetación analizados.

Los diferentes detritos vegetales a estudiar tendrán una composición distinta por lo que en cada cobertura estudiada, se encontrarán bandas características útiles para la identificación de la vegetación que dio origen a la MOS en horizontes sepultados.

Dado que las edades de los horizontes sepultados analizados corresponden a la época de la última glaciación, se espera encontrar una huella espectral que muestre un retroceso en la línea de árboles, a partir de rastros de restos de pastizales dentro de las muestras sepultadas en el sitio de estudio considerando que la línea de árboles se encontraba a los 3,000 m en las montañas del centro de México durante el último máximo glacial.

Capítulo 4

Métodos y análisis estadístico

4.1 Zona de estudio

4.1.1 Faja Volcánica Transmexicana

Los sitios de estudio de este trabajo se ubican dentro de la Faja Volcánica Transmexicana (FVTM) que es el arco volcánico que se desarrolla sobre la margen sudoccidental de la Placa de Norteamérica como resultado de la subducción de las Placas Rivera y Cocos a lo largo de la trinchera de Acapulco (Ferrari, 2000). Este sistema montañoso está constituido por aproximadamente 8000 conos volcánicos que incluyen estratovolcanes, calderas, domos y campos monogenéticos pertenecientes al Terciario tardío y Cuaternario. La extensión de este sistema es de 1000 km y cuenta con un ancho que varía entre los 20 y 150 km. Cruza México desde Puerto Vallarta en el Pacífico hasta Veracruz en el Golfo de México con una dirección Este-Oeste.

4.1.2 Sierra de Chichinautzin

Los sitios ubicados en la parte central de la Faja Volcánica Transmexicana, corresponden a la Cuenca de México delimitada al sur por la Sierra de Chichinautzin, al este por la Sierra Nevada y al oeste por la Sierra de las Cruces y la Sierra de Monte Alto y Monte Bajo (Peña-Ramírez, 2013). La sierra de Chichinautzin es un campo de más de 200 conos cineríticos de edad Pleistocénica a reciente (Settle, 1979). La actividad volcánica en esta sierra se caracteriza por conos de escoria con flujos de lava asociados, volcanes tipo

escudo y domos de lava. Los conos de ceniza constituyen el 91% de las estructuras volcánicas (Márquez, 1998).

Se han distinguido tres etapas eruptivas en la sierra de Chichinautzin con base en dataciones de ^{14}C y los datos de geoquímica de elementos mayores. La primera ocurrió hace 30,000-23,000 años y consistió en emisiones de andesitas y dacitas. La segunda hace 22,000-4,000 años durante la cual se presentaron emisiones de material andesítico a basáltico y la tercera con edad de 3,000 años con la emisión de basalto (Peña-Ramírez, 2013).

Dentro de la sierra de Chichinautzin se trabajó con las muestras obtenidas en la tesis doctoral de Peña-Ramírez (2013) para 6 sitios que se muestran en la Figura 1.

4.1.3 Cofré de Perote

El volcán Cofre de Perote o Nauhcampetépetl, se localiza en el estado de Veracruz, en el extremo oriental de la Faja Volcánica Transmexicana (Rzedowski, 1978). Es la séptima montaña más elevada de México con 11700 ha de superficie que se encuentran protegidas bajo la categoría de Parque Nacional desde 1932 (Narave, 1985).

El volcán Cofre de Perote es un volcán compuesto tipo escudo, es decir no existe un conducto único y los materiales volcánicos fueron extruidos a través de varias bocas eruptivas (Díaz, 2009). Su evolución puede ser dividida en tres etapas de construcción y dos períodos de deconstrucción (Carrasco-Núñez *et al.*, 2006). La primera etapa de construcción fechada por métodos de K/Ar en alrededor de 1.3 ± 0.1 Ma conformada principalmente por andesitas basálticas, mientras que las rocas de la última etapa de formación presentan edades máximas de 0.24 ± 0.05 Ma (Carrasco-Núñez & Nelson, 1998).

Se trabajó con muestras provenientes de este sitio cuya vegetación es de pastizales alpinos ubicados entre los 3454 y los 4422 m de altitud.

4.1.4 Parque Nacional Iztaccihuátl-Popocatépetl

Este Parque se localiza en la parte centro-oriental del Eje Volcánica Transversal, ocupa parte de la sierra Nevada en su porción sur y la sierra de Rio Frio en la parte norte. Comprende los límites de los estados de México, Puebla y Morelos. Dentro de este parque se localizan el Popocatépetl e Iztaccihuatl que son la segunda y tercera cumbre más altas del país respectivamente. Las erupciones del volcán Popocatépetl ocurridas en los últimos 25 mil años cubren la mayor parte de la sierra Nevada (Miehlich, 1991); Macías, 2005).

De este sitio se trabajó con muestras correspondientes a pastizal alpino ubicados entre los 3454 y los 4422 m de altitud.

4.1.5 Parque Ecológico de la CDMX

Este parque se localiza al norte de la alcaldía Tlalpan, CDMX (19°16'23"–19°14'37"N y 99°14'35"–99°10'31"O) (Mendoza-Hernández *et al.*, 2013). Es un área natural protegida también conocida como "Ajusco Medio" (Cano-Santana *et al.*, 2006). El clima en la zona es templado húmedo, con una temperatura anual promedio de 11.1 °C con dos estaciones marcadas a lo largo del año: lluvias de mayo a octubre y secas de noviembre a abril. La precipitación anual promedio es de 1100 mm (Siebe *et al.*, 2016).

De este sitio se obtuvieron muestras de pastizal secundario ubicados a 2,800 m.

4.2 Obtención de muestras para construcción de modelo de vegetación.

El primer paso consistió en coleccionar muestras que representen las coberturas vegetales tipo a analizar para utilizarlas como indicador; es decir, sitios cuyos

suelos actualmente están cubiertos por bosque y por pastizales alpinos. Las muestras de bosque forman una cronosecuencia con diferentes edades del suelo; esta cronosecuencia fue construida y analizada en el trabajo de tesis doctoral de Peña-Ramírez (2013) “Dinámica de la calidad de sitio a través de una cronosecuencia volcánica y sus implicaciones para la productividad forestal” que tuvo como finalidad evaluar las distintas etapas y cambios que sufren suelos formados de tefras volcánicas. Para dicha evaluación realizó descripciones de perfiles de suelo construyendo una cronosecuencia fechada por el método de ^{14}C , en la zona central de la Faja Volcánica Transmexicana. El presente trabajo utiliza las muestras de horizontes superficiales Ah y muestras de horizontes sepultados Ah y Bw.

Las muestras de pastizal alpino se obtuvieron de tres sitios diferentes. Las primeras se obtuvieron de la tesis de licenciatura de Galván, (2016) “Impacto de la zanja trinchera sobre la calidad del suelo en laderas medias del Parque Nacional Iztaccihuatl-Popocatepetl”. El resto de las muestras de pastizal alpino fueron recolectadas en Cofre de Perote, dentro del Parque Nacional Iztaccihuatl-Popocatepetl y dentro del Parque Ecológico de la CDMX. La Tabla 1 presenta un resumen de las muestras empleadas.

Tabla 1. Muestras utilizadas para la construcción del modelo. * Muestras dentro de la cronosecuencia de Peña-Ramírez (2013).

Vegetación	Sitio	Nomenclatura	Edad
Bosque	*Chichinautzin	Chi	Joven
	*Cuespalapa	Cue	Joven
	*Tlaloc	Tla	Intermedio
	*Cuautzin	Cua	Intermedio
	*Pelado	Pel	Viejo
	*Malacatepec	Mal	Viejo
Pastos	Izta-Popo	PL y PE	-
	PE-CDMX	PA	-

	Cofre de Perote	PB	-
--	-----------------	----	---

4.3 Preparación de las muestras para el modelo

Las muestras de los horizontes superficiales fueron secadas en estufa a 65 °C y posteriormente tamizadas con una malla de 2 mm. La fracción <2 mm se procesó en un molino de ágata para la obtención de una mezcla homogénea de partículas <20 µm. Las muestras de la cronosecuencia de estudio seleccionadas para realizar el modelo, son muestras que actualmente se encuentran en superficie como se muestra en el Figura 1.

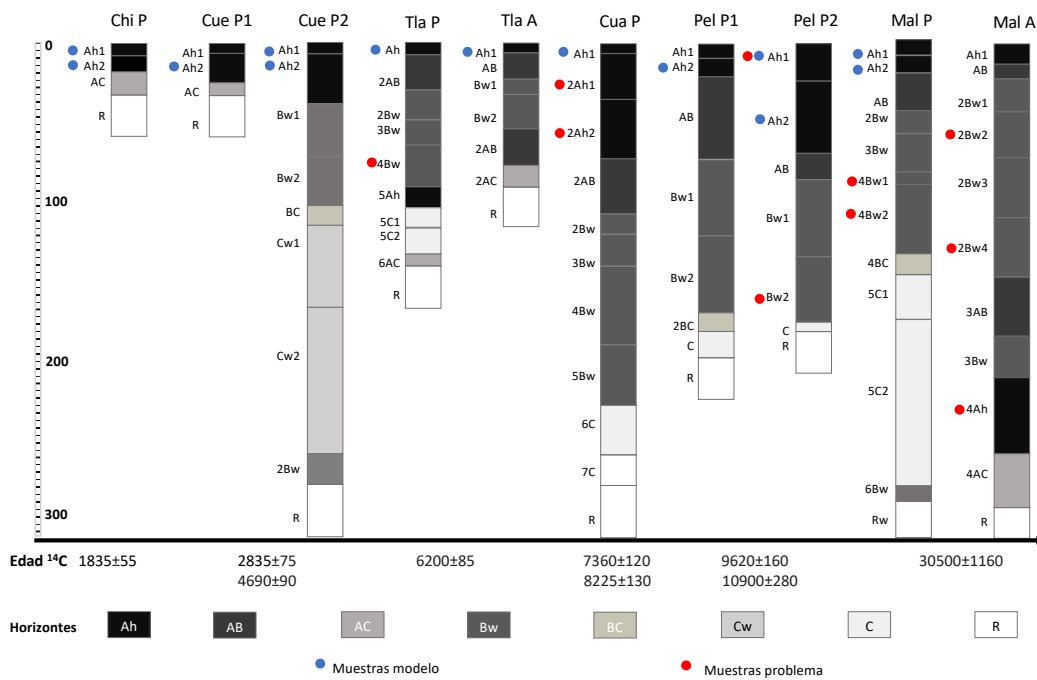


Figura 1. Modificada de Peña-Ramírez (2013). Horizontes y espesores que conforman la cronosecuencia. También se muestran las dataciones con ¹⁴C. En azul se muestran las muestras empleadas para el realizar el modelo y en rojo las muestras problema dentro de la cronosecuencia.

4.4 Análisis con espectroscopía de infrarrojo por Transformada de Fourier.

Para dicho análisis se utilizaron 15 mg de muestra de suelo, previamente secada, que se mezclaron con 200 mg de bromuro de potasio (KBr), secado en estufa a 105 °C. Las lecturas se realizaron por duplicado en un espectrómetro de infrarrojo Varían 3100 FTIR Excalibur Series utilizando como fondo el KBr. Para homogenizar dicha mezcla se molió en un mortero de ágata. Los espectros se obtuvieron dentro del rango de 4000-600 cm^{-1} con una resolución de 2 cm^{-1} , con un total de 100 escaneos, posteriormente se suavizaron para eliminar el ruido presente en ellos.

4.5 Depuración de la base de datos.

Para el análisis estadístico, se removieron las frecuencias comprendidas en la región de los 2500-1900 cm^{-1} debido a la influencia del CO_2 en dicha región, como producto de la respiración del individuo al realizar el análisis y la humedad relativa del sitio. Asimismo, se removieron las regiones del espectro mayores a 2000 cm^{-1} debido a la influencia de la parte cristalina (inorgánica) de la muestra en el modelo y menores a 600 cm^{-1} por el ruido presente en dicha región.

4.6 Análisis estadístico.

4.6.1 Análisis de componentes principales.

La técnica utilizada para concentrar la información de los espectros de infrarrojo fue el análisis de componentes principales (ACP). Para realizar dicha técnica se utilizaron los datos centrados y no escalados. Los resultados de esta técnica se resumieron utilizando las cargas y coordenadas resultantes utilizando las respectivas combinaciones lineales. Las componentes se utilizaron para construir

nuestro modelo de vegetación y utilizar a la materia orgánica del suelo como proxy de la vegetación del suelo.

4.6.2 Clusters

Con la finalidad de realizar una clasificación, se realizó un análisis de conglomerados utilizando los primeros cuatro CP que contienen el 99.14 % de la varianza de los datos, distribuidos de la siguiente manera: CP1 78.22%, CP2 17.98%, CP3 2.4% y CP4 0.54%.

Para dicho análisis se emplearon 4 métodos aglomerativos diferentes los cuales se basan en la distancia existente entre los diferentes elementos. Los métodos empleados fueron el del vecino más cercano (single), que toma en consideración la distancia mínima que hay entre elementos de cada grupo; el vecino más lejano (complete), que considera que la distancia entre grupos estará dada por la distancia máxima entre los elementos de dichos grupos; el promedio entre grupos (rutina average) que emplea el promedio para medir la distancia entre los grupos y el método Ward que emplea la suma de cuadrados para el cálculo de la distancia entre grupos. Los dendrogramas resultantes de cada método se pueden consultar en el Anexo A del presente documento.

4.7 Clasificación basada en modelos (CBM)

4.7.1 Construcción del modelo

Con las coordenadas (scores) obtenidas del ACP (cronosecuencia de bosques y pastizales alpinos) se obtuvieron grupos basados en un modelo de mezclas Gaussianas finito (CBM), empleando los primeros cuatro CP. Es importante destacar que se empleó esta clasificación debido a que se corroboró con diversas rutinas aglomerativas (4), obteniendo prácticamente la misma clasificación. Las

diferentes clasificaciones obtenidas se pueden consultar en el anexo A contenido en este trabajo.

La CBM se empleó como modelo para definir los diferentes grupos formados a partir de las muestras superficiales de la cronosecuencia de bosques y las muestras de pastizales alpinos. Posteriormente se determinó la probabilidad de un elemento, con vegetación desconocida (muestra problema), de pertenecer a uno de los grupos formados. Esto nos ayudaría a estimar la probabilidad de que la materia orgánica presente en un horizonte enterrado refleje el tipo de vegetación existente (bosque o pastizal) durante el proceso de su pedogénesis.

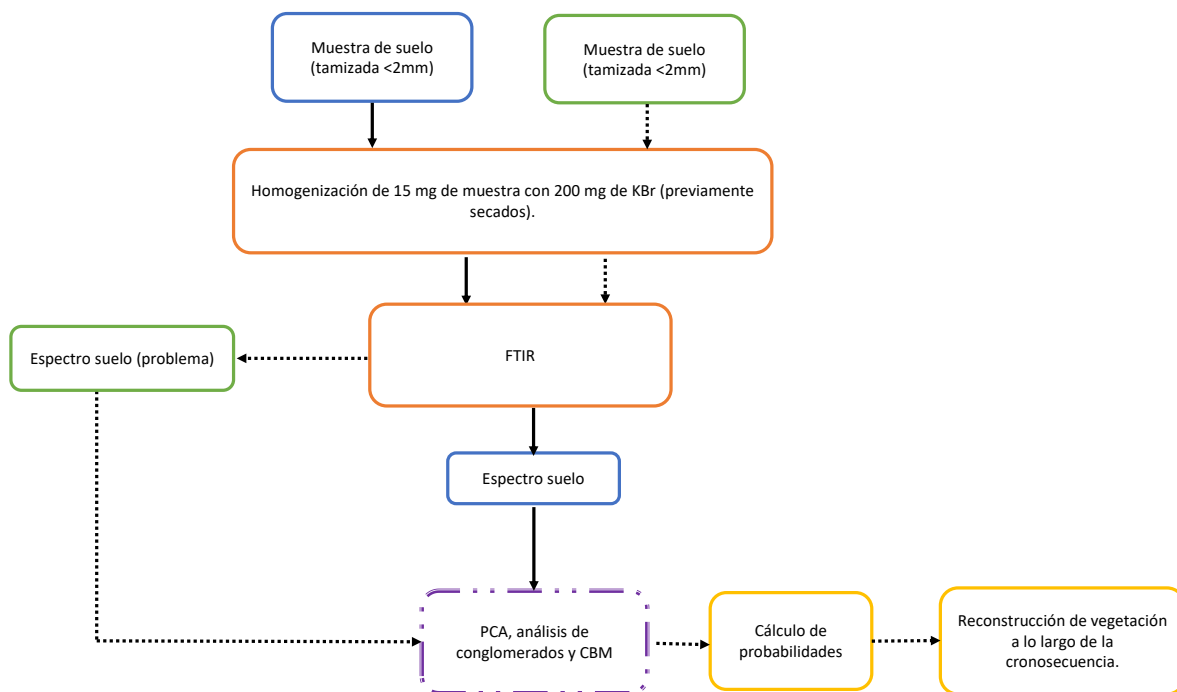


Figura 2. Diagrama de flujo del procedimiento empleado. La línea continua representa el procedimiento para las muestras empleadas para la elaboración del modelo; la línea punteada representa el procedimiento de las muestras problema.

3.8 Muestras Problema

Una vez construido el modelo, se utilizó para designar o conocer la vegetación que existió durante el proceso de pedogénesis de los horizontes enterrados. A las muestras provenientes de horizontes enterrados de la cronosecuencia, se les denominó muestras problema. La mayoría de las muestras problema corresponden a los horizontes de suelo superficiales de la cronosecuencia de Peña-Ramírez (2013), que hoy se encuentran sepultados, como se muestra en la Figura 1.

Para comprobar la estabilidad y funcionamiento del modelo, se agregaron como muestras problema, muestras con vegetación distinta a las estudiadas. Estas muestras se extrajeron del trabajo de tesis doctoral de Sánchez González (2018) “Materia orgánica y su interacción con superficies minerales en suelos del Valle del Mezquital”, cuya vegetación corresponde a matorral xerófilo.

4.9 Cálculo de probabilidades

El pretratamiento y análisis estadístico de las muestras problema fue idéntico a las muestras empleadas para la elaboración del modelo, eliminación de secciones del espectro y suavizado de los espectros. Con dichos espectros se calcularon sus coordenadas (ACP-coordenadas) utilizando la estructura de los componentes principales obtenido con las muestras del modelo de vegetación bosque-pastizal. Con las coordenadas del ACP realizado a las muestras problema se determinó la probabilidad que tendrían éstas de caer (localizarse o pertenecer) en cada uno de los grupos que arrojó la clasificación basada en modelos. Cada muestra problema se asignó al grupo que presentaba la mayor probabilidad y con ello se determinó el tipo de vegetación presente en dicho horizonte sepultado.

Todos los análisis se hicieron con el uso del software “R-Project versión 3.5.3” y con ayuda de las paqueterías ChemoSpec, R.Utills, mclust, cluster y mvt norm.

Capítulo 5

Resultados

5.1 FTIR-espectros

Los espectros de infrarrojo obtenidos de las muestras de los horizontes superficiales y subsuperficiales (Ah, Ah2 y B) analizadas durante este estudio se pueden observar en la Figura 3. La mayoría presentan un patrón similar, con picos de mayor intensidad en la región comprendida entre los 500 y 2,000 cm^{-1} y picos de menor intensidad en la región correspondiente a longitudes de onda mayores a los 2,500 cm^{-1} . Se observan diferentes picos a lo largo del espectro; los espectros de las muestras de bosque muestran los picos más altos y estrechos como se aprecia en la Figura 3. El resto de las muestras presentan picos con menor intensidad a lo largo del espectro. En general los espectros muestran picos en la región de stretching (estiramiento) de los enlaces O-H y C-H (3,600-2,800 cm^{-1}), C=O (1,750-1,400 cm^{-1}) y en la región de las bandas de huellas dactilares (1,400-400 cm^{-1}) (Picariello *et al.*, 2021).

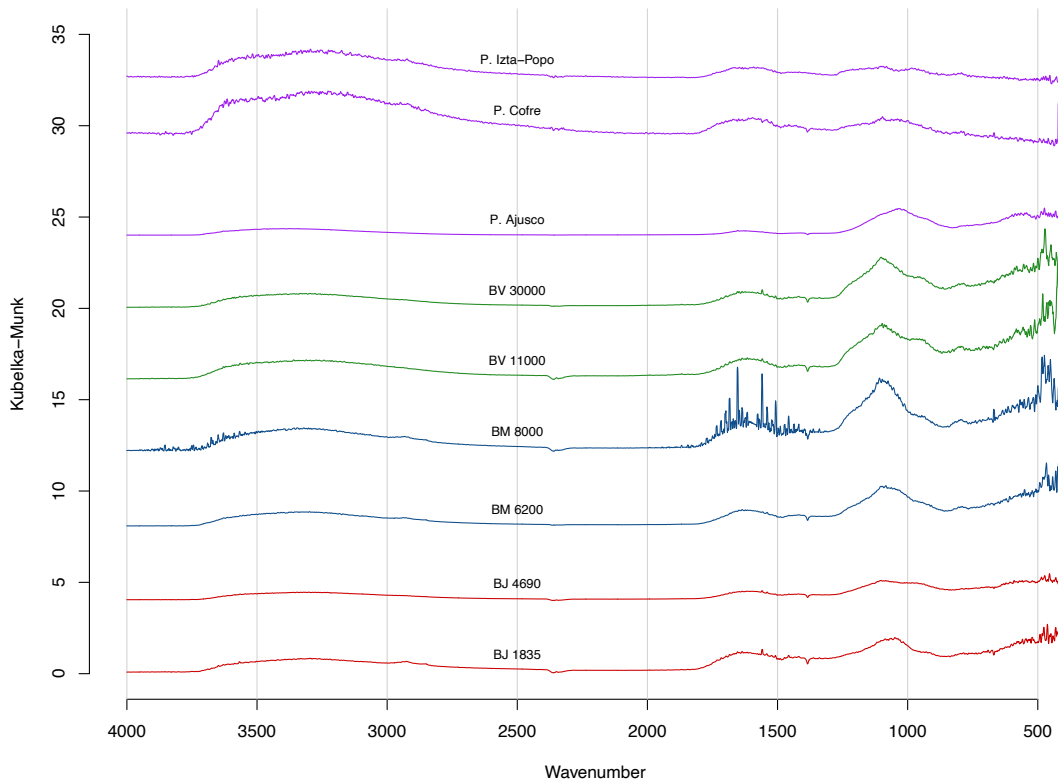


Figura 3. Espectros IR muestras de suelos con cobertura de bosque por edad (líneas de colores rojo, azul y verde) y suelos con pastizal (línea color lila), horizontes Ah.

Además se observa que los espectros de los horizontes con cobertura de bosque presentan un patrón similar con frecuencias de alta intensidad en la región comprendida entre los 800 y 1,300 cm^{-1} , frecuencias de menor intensidad entre los 1,300 y 1,800 cm^{-1} y alrededor de los 3,500 cm^{-1} , lo cual dificulta diferenciarlos entre sí. Las muestras de los suelos jóvenes bajo bosques (BJ) y suelos de edad media bajo bosques (BM) muestran los picos más estrechos y definidos (Figura 3). Por su parte, los espectros de pastos correspondientes a los sitios Cofre de Perote y Parque Izta-Popo, muestran picos en las mismas posiciones respecto a aquellos espectros correspondientes a coberturas boscosas; sin embargo, la intensidad de estas señales es menor para los picos comprendidos entre los 800

y 1,800 cm^{-1} y un pico de mayor intensidad alrededor de los 3,500 cm^{-1} mientras que los pastizales del sitio Ajusco guardan similitud con bosques en suelos viejos. En la Tabla 2, se muestra la intensidad que tienen las señales en regiones específicas del espectro para cada grupo de muestras.

Tabla 2. Intensidad de las señales por grupo de muestras. +++++ Muy fuerte,+++ Fuerte, ++ Intermedia, + Débil.

Frecuencia (cm^{-1})	Bosque en suelos jóvenes (BJ)	Bosque en suelos medios (BM)	Bosque en suelos viejos (BV)	Pasto Ajusco	Pasto Cofre de Perote	Pasto Popolza
3500	+	+	+	+	++	++
1300-1800	+	+++	++	+	+	+
800-1300	++	++	+++	+	+	+
500	+	++	++	+	+	+

5.2 ACP

Para concentrar la información contenida en los espectros y poder encontrar diferencias entre los espectros se realizó un análisis de componentes principales (ACP). A continuación, se presentan los resultados del ACP mediante el porcentaje de varianza asociado a cada componente principal (CP), las coordenadas y las cargas de cada CP.

5.2.1 ACP-Varianza

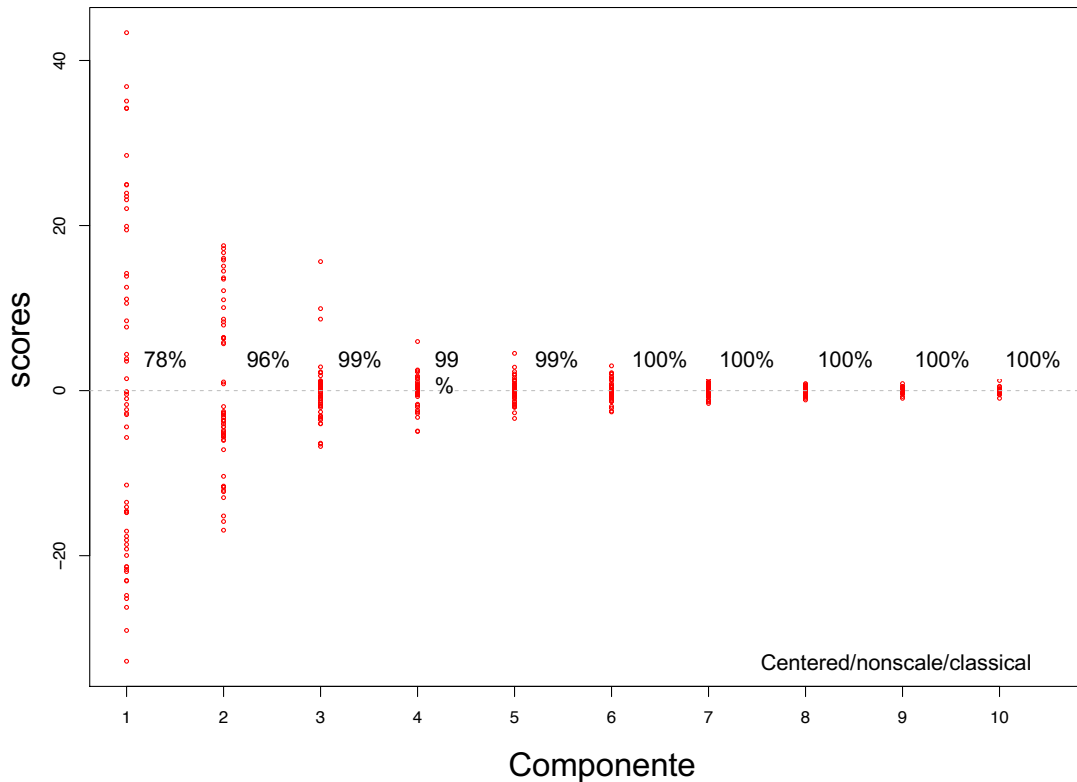


Figura 4. Porcentaje de varianza acumulada por componente.

Como resultado de dicho análisis se obtuvo que el primer componente concentra el 78.22 % de la varianza, el segundo concentra el 17.98 % de la varianza. Se decidió emplear los primeros 4 CP dentro de los cuales queda concentrado el 99.14% de la información como lo muestra la Figura 4. Cabe mencionar que a partir del componente 3 acumulamos el 99%; y después del componente 3 el porcentaje de varianza que se acumula es muy pequeño. Sin embargo, a partir del componente 4 podemos observar los detalles o rasgos peculiares de cada espectro debido a que esta técnica nos permite amplificar las pequeñas variaciones dentro de los espectros. Las bandas de menor intensidad serán las responsables de las diferencias entre sitios en la MOS. Por lo anterior, se decidió trabajar 4 Componentes Principales para realizar una clasificación basada en

modelos (CBM) con las coordenadas de cada uno de los CP empleados. Esto permitió encontrar estas pequeñas diferencias entre espectros provenientes de muestras de suelo con diferente cobertura vegetal. Lo cual es importante ya que de trabajar con más de 3700 variables (cada punto del espectro representa una variable) se sintetizó el 99.14 % del total de la información en 4 nuevas variables haciendo que el análisis sea más sencillo.

5.2.2 ACP-coordenadas.

Las coordenadas representan el valor que tienen las muestras analizadas en cada uno de los CP, éstas son útiles para representar de manera gráfica la diferencia o similitud entre las diferentes muestras. Las muestras que presenten valores similares en las coordenadas tendrán características similares, mientras que las muestras que presenten las coordenadas más distantes entre sí presentan más diferencias. Utilizando este principio, las figuras 4 y 5 muestran los resultados de las coordenadas entre los CP 1 y 2 (Figura 5) (96.2 %) y CP 3 y 2 (Figura 6) (20.3%) respectivamente. Se optó por una mejor representación de la información mediante las coordenadas del PC2 vs PC3 (20.3 %), ya que esta representación muestra con mayor claridad la separación entre las coberturas vegetales estudiadas.

Tanto en la Figura 5 como en la Figura 6, se aprecia que el CP 2 muestra una separación entre los tipos de vegetación estudiadas. Las muestras de horizontes con cobertura de pastizal alpino empleadas en este trabajo toman valores negativos para este componente, mientras que aquellas muestras que presentaban cobertura boscosa se ubican en la parte positiva siendo la excepción las muestra con cobertura de pastizal provenientes del Ajusco que se encuentran en la región positiva del CP 2.

En la Figura 6 se observa que tanto el CP 2 como el 3, proporcionan información sobre la edad de los suelos bajo cobertura de bosque estudiados ya que para el

CP 2, los bosques que crecen sobre suelos más jóvenes se ubican en valores positivos cercanos a cero mientras que los bosques que crecen sobre suelos más longevos se ubican en regiones más distantes al cero. Para el CP 3, los bosques sobre suelos jóvenes tienen valores positivos, en contra parte a los bosques sobre suelos viejos que se ubican en la región negativa de este componente. Debido a la información que proporcionan los CP, la imagen y que muestra las coordenadas de las muestras para estos dos componentes se utilizó como modelo de referencia.

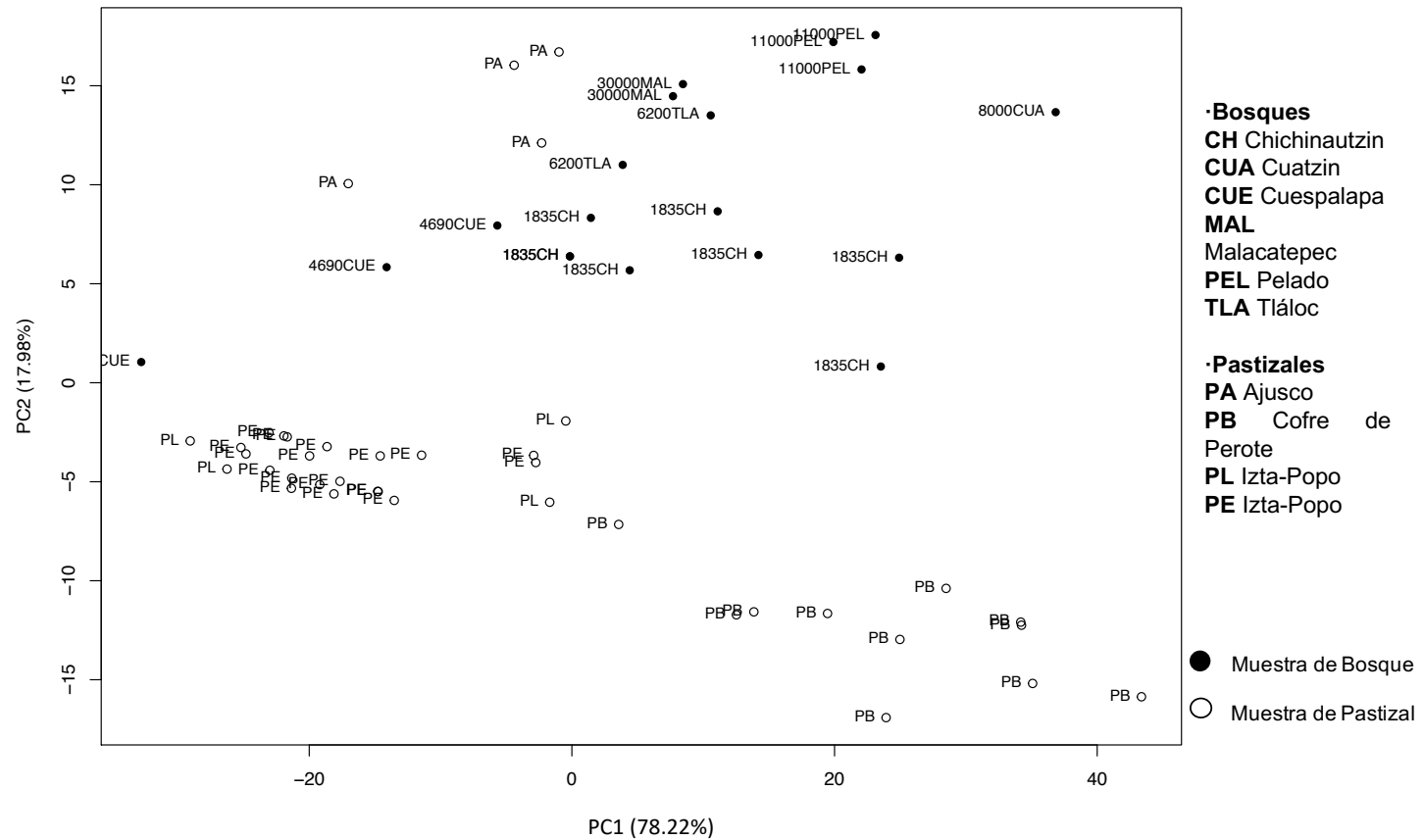


Figura 5. Coordenadas CP 1 vs CP2. Los puntos sólidos representan muestras de bosque, mientras que los puntos vacíos representan muestras de pasto. Para las muestras de bosque se muestran las edades de los suelos.

Tanto en la Figura 5 como en la 6 se puede observar que las muestras de bosques sobre suelos jóvenes toman valores positivos cercanos a cero. Por otro lado, las muestras que corresponden a suelos de edades más viejas se ubican en regiones más distantes al cero tomando como referencia el CP2.

Como se puede apreciar en la Figura 5, el CP 1 no muestra información relevante para el estudio, ya que tanto los suelos con pastos como con bosques se distribuyen a lo largo de dicho componente tomando valores tanto positivos como negativos. Esto se debe a que el PC1 refleja características de la fase mineral del suelo.

5.2.3 PCA- cargas.

Las cargas proporcionan información sobre los picos o frecuencias que presentan mayor influencia dentro de cada uno de los CP, es decir aquellas frecuencias que sirven como diferenciador dentro de cada CP. La Figura 7 muestra las cargas que tienen mayor peso dentro de cada uno de los componentes principales, en ella podemos observar que dentro del ACP las cargas pueden tomar tanto valores positivos como negativos.

En la Tabla 6 (Anexo) , que se encuentra en el anexo de este documento se enlistan las bandas características para cada una de las vegetaciones estudiadas.

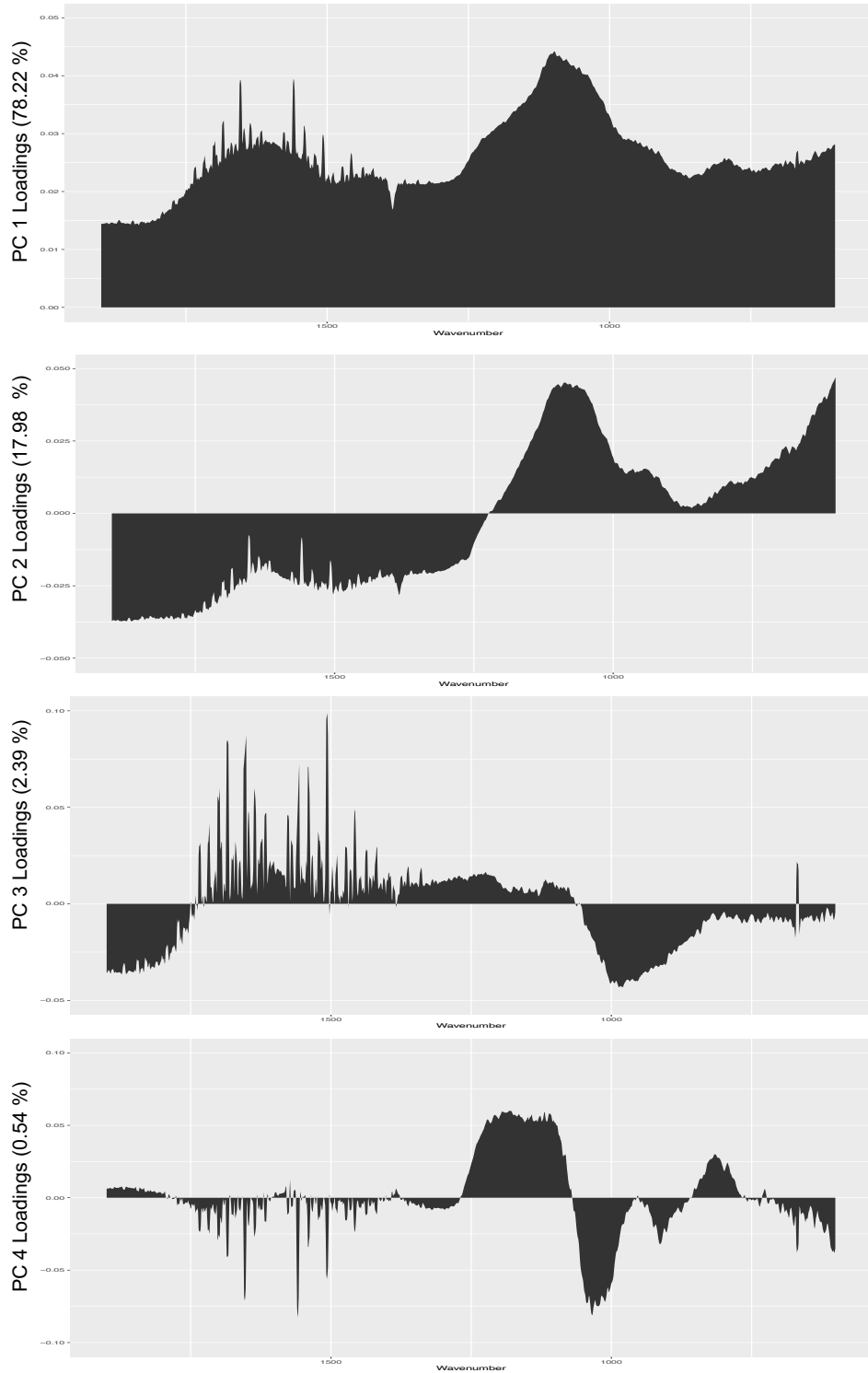


Figura 7. Cargas asociadas a los diferentes componentes principales, a) PC 1 (78.22%), b) PC 2 (17.98%), c) PC 3 (2.39%) y d) PC 4 (0.55 %)

5.3 Clasificación Basada en Modelos

Las Figuras 5 y 6 son una representaciones gráficas de la similitud o diferencias entre las muestras, todo esto a través de las ACP-coordenadas. Como se mencionó anteriormente, las coordenadas de cada muestra dentro del CP2 después del ACP permiten hacer una diferenciación entre las diferentes vegetaciones estudiadas (bosques y pastos). A partir de este principio se realizó una Clasificación Basada en Modelos (CBM), para encontrar conjuntos de muestras lo suficientemente cercanas entre sí para formar un grupo y lo suficientemente alejadas para diferenciarse de sus vecinos. Lo anterior, con la finalidad de encontrar las características que presenta cada grupo formado con base en la similitud de sus espectros en función del tipo de vegetación y la edad en el caso de las muestras pertenecientes a las muestras de la cronosecuencia. Dicha clasificación se comparó con diversos análisis de conglomerados obteniendo prácticamente los mismos grupos. Los clusters obtenidos se pueden consultar en los anexos.

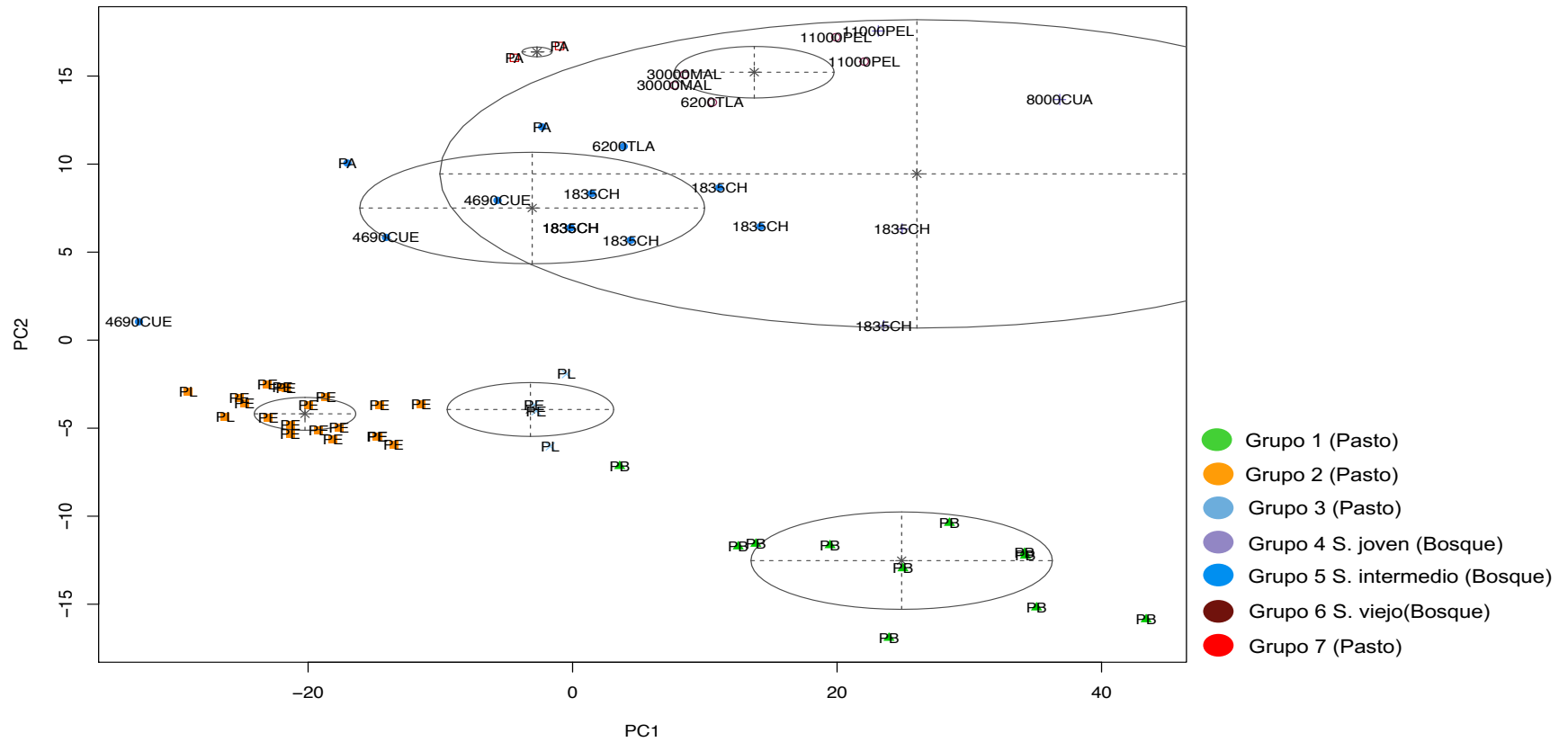


Figura 8. Clasificación basada en modelos (CP1 vs CP2)

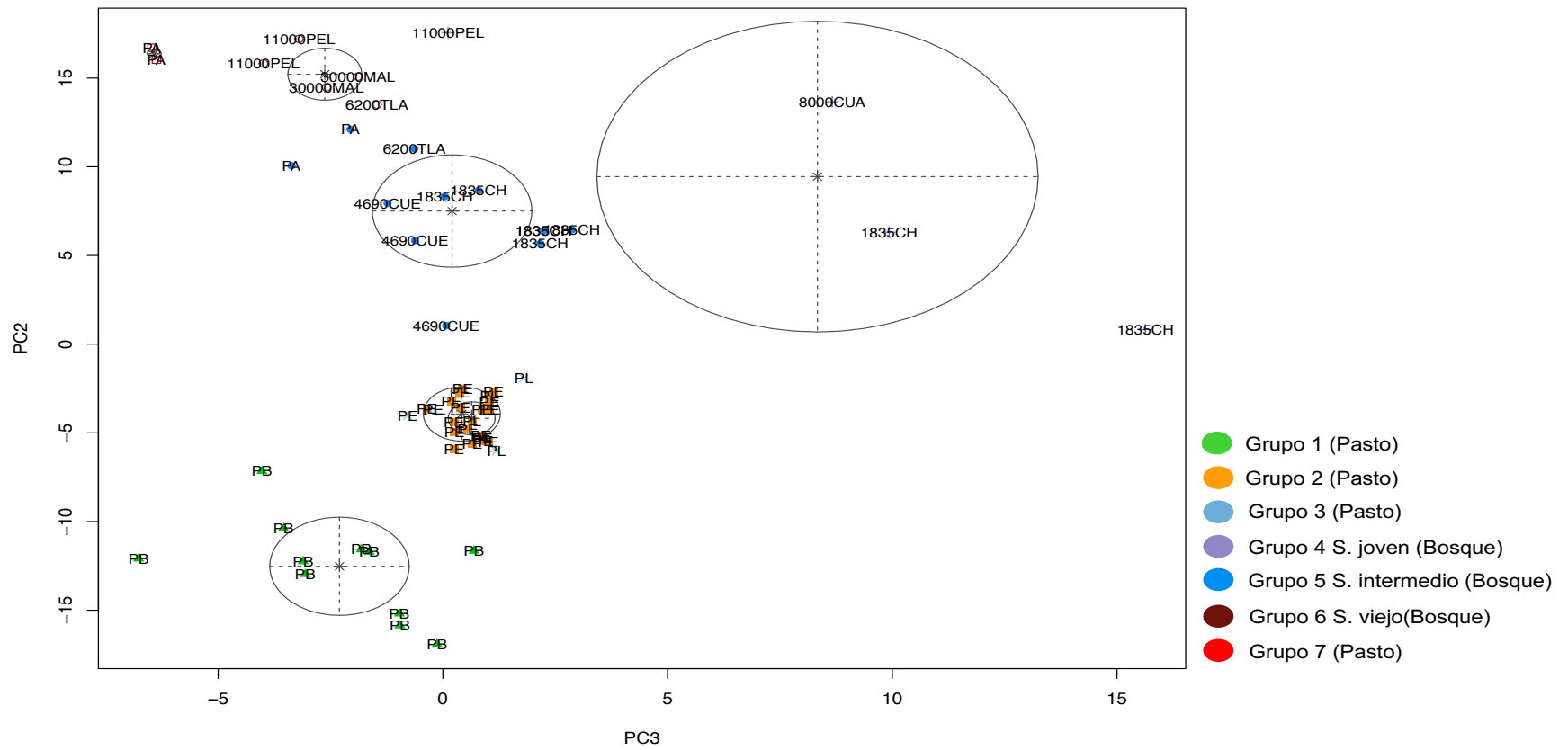


Figura 9. Clasificación basada en modelos (CP3 vs CP2)

Los resultados de la CBM se muestran en las figuras 8 y 9; donde podemos observar que se produjeron 7 grupos. En ellas se puede observar que los grupos 1, 2, 3 corresponden a coberturas de pastos y los grupos 4, 5, 6 se encuentran bajo cobertura de bosque; cabe mencionar que el grupo 7 que está etiquetado como muestras provenientes de pastizal se encuentra en el dominio positivo del PC2 donde encontramos a los suelos con bosques; estas muestras fueron colectadas en el parque Ecológico de la Ciudad de México, en las faldas del Ajusco sobre un piedemonte coluvial. Dentro de los grupos con cobertura de bosque se tiene que el grupo 4 contiene muestras de bosques que se desarrollaron sobre suelos jóvenes; el grupo 5 contiene las muestras de bosque que crecen sobre suelos con edades intermedias y por último el grupo 6 contiene las muestras que crecen sobre suelos de edades más avanzadas y algunas muestras de pasto del sitio de piedemonte del Ajusco. El grupo 7 contiene muestras de suelos bajo cobertura de pastos del sitio Ajusco. Como estamos enfocados en el análisis de los detalles, consideramos que la Figura 9 proporciona una mejor representación de los grupos formados.

En la siguiente lista se muestra una descripción de las características que posee cada grupo formado en la CBM.

- Grupo 1: Suelos con cobertura de pastizales alpinos recolectados en la región de Cofre de Perote.
- Grupo 2: Suelos con cobertura de pastizales alpinos recolectados en la zona del Parque Iztaccíhuatl-Popocatepetl.
- Grupo 3: Suelos con cobertura de pastizales alpinos recolectados en la zona del Parque Iztaccíhuatl-Popocatepetl.
- Grupo 4: Bosques sobre suelos jóvenes con edades de menores a 6,000 años
- Grupo 5: Bosques sobre suelos intermedios con edades entre los 8,000-10,000 años aproximadamente.

- Grupo 6: Bosques viejos sobre suelos con edades comprendidas entre los 6,000 y los 30,000 años aproximadamente y algunas muestras de pastizales del Ajusco.
- Grupo 7: Suelos con cobertura de pastizales del sitio Ajusco.

Como se mencionó con anterioridad, las coordenadas de las muestras de pasto del Ajusco se localizan cerca de los bosques de mayor edad, incluso dos de ellas en realidad se localizan en este último tipo de vegetación, por lo que son de interés para este trabajo.

Uno de los objetivos de este trabajo, es determinar el tipo de vegetación que estuvo presente en horizontes superficiales y subsuperficiales dentro de la cronosecuencia de suelos volcánicos (Peña-Ramírez, 2013) que hoy se encuentran sepultados. Por ello se conjuntaron aquellos grupos que tienen el mismo tipo de vegetación y edades similares para simplificar el análisis de la siguiente manera:

Se conjuntaron los grupos 1, 2 y 3 ya que estos tres grupos están separados del resto y contienen muestras de pastizales. La siguiente división de los bosques se realizó con base en la edad del suelo; el grupo 4 se mantuvo de la misma manera, ya que diferencia de manera clara las muestras de los bosques que crecen en suelos más jóvenes. El grupo 5 se mantuvo del mismo modo, ya que en el se encuentran muestras de bosque con suelos de edades intermedias. Por último, el grupo 6 y 7 se conjuntaron a pesar de tener muestras de pasto y bosque. Esto se realizó ya que debido a la edad de los suelos de donde provienen es factible que en ellas se encuentre contenida MOS tanto de bosque como de pastos. La Figura 10 muestra el grupo asignado dentro de la CBM a cada una de las muestras de la cronosecuencia empleadas para la construcción del modelo. Se observa que la CBM agrupa de manera correcta las muestras de bosques en función de la edad de los suelos.

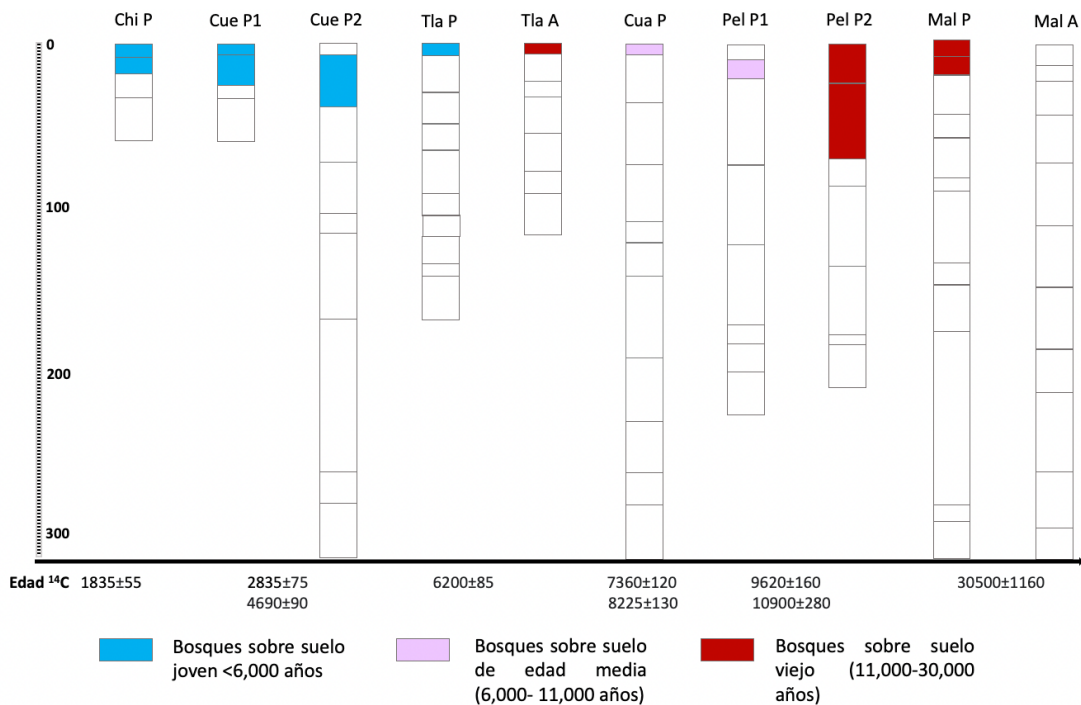


Figura 10. Grupo asignado por la CBM a las muestras de la cronosecuencia dentro del modelo.

5.4 Muestras problema

Las muestras problema corresponden a horizontes superficiales y subsuperficiales que en la actualidad se encuentran sepultados dentro de la cronosecuencia de Peña-Ramírez (2013) cuya vegetación, presente en el momento del desarrollo de ese horizonte, es desconocida. Una vez analizadas estas muestras presentaron espectros similares (Figura 11), siendo el pico ubicado en la región comprendida entre los 900 y 1,200 cm^{-1} donde se aprecian las diferencias más evidentes entre espectros.

Debido a las similitudes en los espectros, estos se sometieron a la CBM previamente elaborada, dando como resultado la distribución presente en la Figura 13.

Con fines de comprobación, se introdujeron diferentes muestras que no corresponden a las coberturas vegetales estudiadas para “probar” al modelo construido; estas corresponden a vegetación de matorral y de cultivo. Los espectros de estas muestras (Figura 12) presentaron patrones similares con un pico de absorción intenso entre los 1,200-1,500 cm^{-1} , un pico de menor intensidad alrededor de los 1,700 cm^{-1} y un tercer en la región de los 3,600 cm^{-1} . A diferencia de los espectros correspondientes a una cobertura de cultivo (rotación maíz-alfalfa), los espectros que contienen matorral presentaron un pico de baja intensidad alrededor de los 1,400 cm^{-1} .

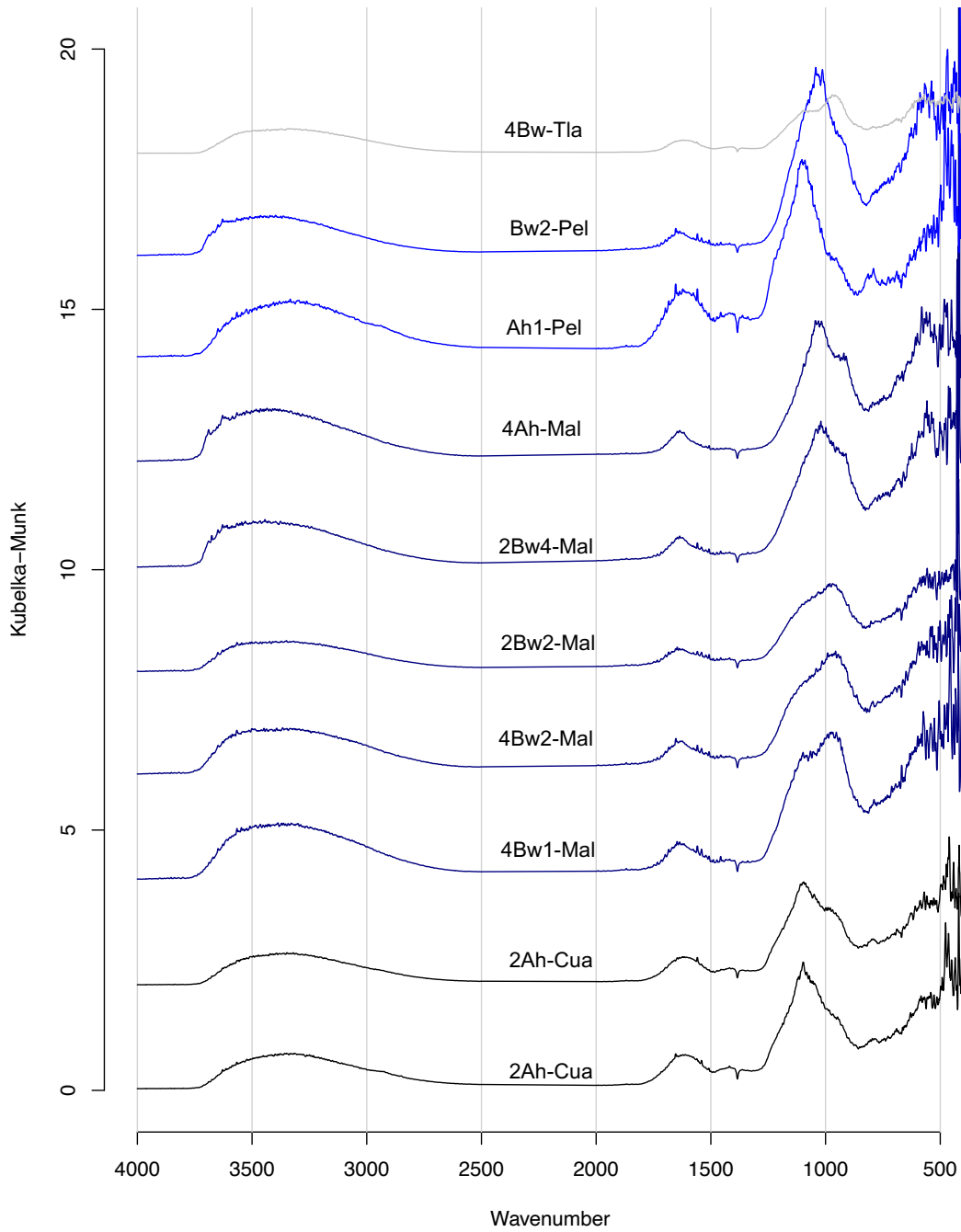


Figura 11. Espectros infrarrojo de las muestras problemas de horizontes Ah y Bw sepultados, dentro de la cronosecuencia de Peña-Ramírez, 2013.

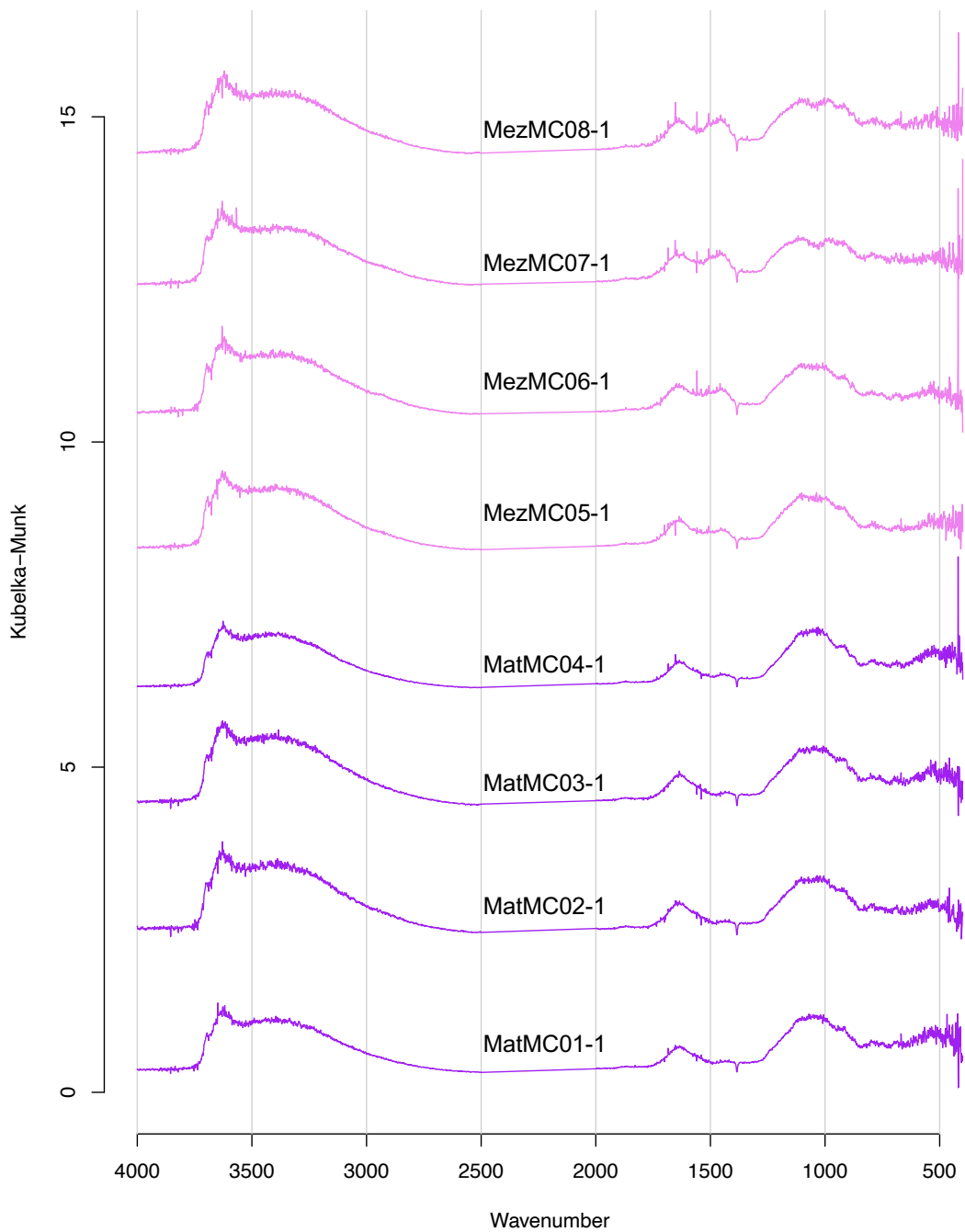


Figura 12. Muestras control correspondientes horizontes Ap provenientes de una parcela de cultivo vegetación de cultivo (rotación alfalfa-maíz) (color morado) y a matorral xerófilo (color rosa).

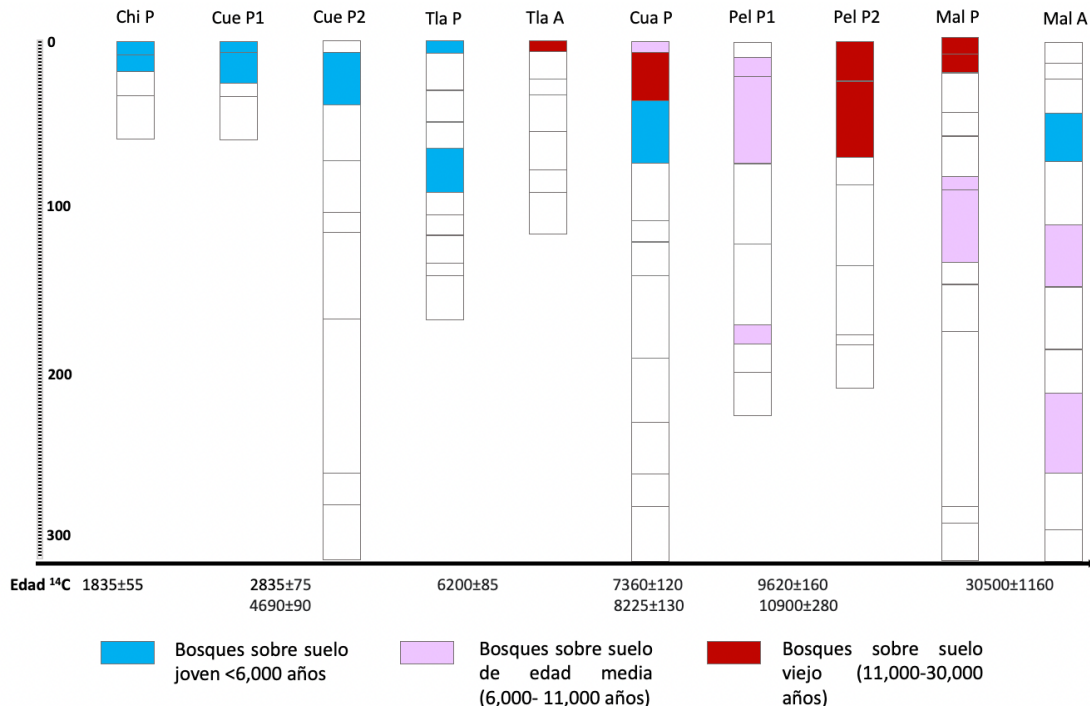


Figura 15. Vegetación asociada por la CBM a las muestras problema dentro de la cronosecuencia analizada.

5.5 Cálculo de las probabilidades

Con la información de las coordenadas obtenidas del análisis de Componentes Principales para una serie de 22 muestras problema y empleando como modelo una clasificación la CBM, se calculó la probabilidad de una serie de muestras problema para saber si pertenecen a uno de los siete grupos formados por la CBM. Algunos grupos de la CBM se unieron como se mencionó en la sección anterior por lo que la probabilidad de pertenecer a estos grupos colapsados será equivalente a la suma de las probabilidades que presenta cada uno de estos grupos de manera aislada. En la Figura 16 se muestra la probabilidad de las muestras problema que corresponden a los horizontes superficiales que hoy están sepultados dentro de la cronosecuencia de Peña-Ramírez (2013); se aprecia que la probabilidad de pertenecer a otro grupo es bastante baja siendo la probabilidad asignada más baja del 64 % en una muestra.

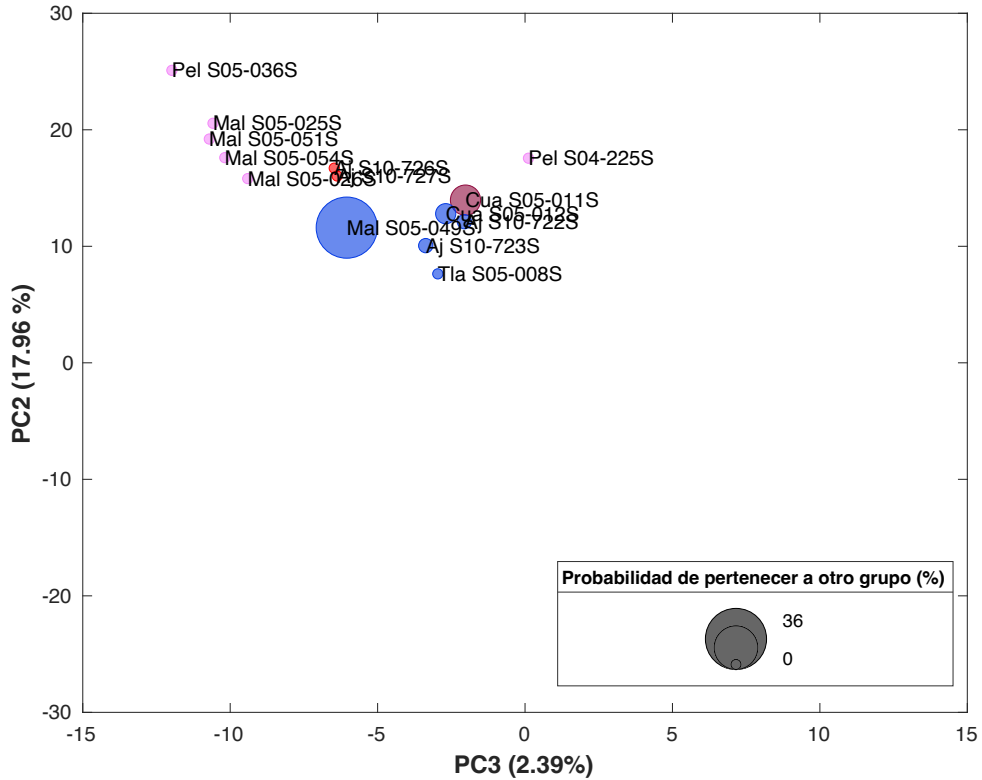


Figura 16. Localización de las muestras problema dentro de la cronosecuencia en los CP 2 y 3 y su probabilidad de pertenecer a un grupo diferente al asignado por la CBM. El color representa el grupo asignado por la CBM.

Con propósitos de verificación se añadieron muestras que no corresponden a vegetación de pasto o bosque y son suelos agrícolas y con matorral xerófilo Sánchez (2017). La probabilidad de las muestras problema (Cronosecuencia y de control) y sus coordenadas se ve reflejada en la Figura 17. En ella se observa que la probabilidad de pertenecer a otro grupo distinto al asignado para las muestras de control es mayor, esto se debe a que son muestras con distinto tipo de vegetación respecto a los estudiados.

Tabla 3. Probabilidad de cada muestra problema. *Muestras de Peña-Ramírez
(2013)

Sitio	Grupo vegetación	Probabilidad asignada(%)
Ajusco	B. jóvenes e intermedios	99
Ajusco	B. jóvenes e intermedios	99
Ajusco	Pastos	100
Ajusco	Pastos	100
Cuauhtzin	Bosque viejo	92
Cuauhtzin	B. jóvenes e intermedios	97
Malacatepec	B. jóvenes e intermedios	100
Malacatepec	B. jóvenes e intermedios	100
Malacatepec	B. jóvenes e intermedios	64
Malacatepec	B. jóvenes e intermedios	100
Malacatepec	B. jóvenes e intermedios	100
Valle del Mezquital	B. jóvenes e intermedios	100
Valle del Mezquital	B. jóvenes e intermedios	98
Valle del Mezquital	B. jóvenes e intermedios	99
Valle del Mezquital	B. jóvenes e intermedios	100
Valle del Mezquital	B. jóvenes e intermedios	89
Valle del Mezquital	Pasto	73
Valle del Mezquital	Pasto	98
Valle del Mezquital	B. jóvenes e intermedios	56
Pelado	B. jóvenes e intermedios	100
Pelado	B. jóvenes e intermedios	100
Tlaloc	B. jóvenes e intermedios	100

5.6 Cronosecuencia

Las muestras tomadas del trabajo doctoral de Peña-Ramírez (2013) serán utilizadas para realizar la reconstrucción de la línea de árboles con base en los horizontes superficiales o subsuperficiales registrados a lo largo de la cronosecuencia. Para ello, en la tabla 4 se muestran las características de cada una de las muestras y las probabilidades obtenidas de pertenecer a uno de los grupos formados en la CBM.

Tabla 4. Características muestras problema

Muestra	Localidad	Horizonte	Profundidad (cm)	Grupo	Probabilidad (%)
1	Cuauhtzin	2Ah	6/8-28/47	Bosque bajo suelo viejo	92
2	Cuauhtzin	2Ah	28/43-73/79	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	97
3	Malacatepetl	4Bw1	84-95	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	100
4	Malacatepetl	4Bw2	95-137	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	100
5	Malacatepetl	2Bw2	45-71/75	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	64
6	Malacatepetl	2Bw4	108/118-150	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	100
7	Malacatepetl	4Ah	212-260	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	100
8	Pelado	Ah1	0-18/29	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	100
9	Pelado	Bw2	120/132-168	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	100
10	Tlaloc	4Bw	68-95	Bosque bajo suelos jóvenes e intermedios	100

Capítulo 6

Discusión

6.1 Espectros FTIR

Los espectros de infrarrojo muestran los enlaces que conforman las moléculas presentes en la Materia Orgánica del Suelo. Estos enlaces provienen de diferentes moléculas presentes en los detritos vegetales. Para el trabajo fue de gran importancia identificar las bandas con intensidades sobresalientes, debido a que nos ayudan a identificar la presencia de diferentes biomoléculas como lignina, celulosa, hemicelulosa entre otras ya que la presencia/ausencia de estas bandas sugieren el origen de la MOS a partir de un tipo u otro de cobertura vegetal en función de su abundancia.

En la Figura 18, se encuentran las bandas que (Bui *et al.*, 2015), Chapman *et al.*, (2001); Djukic *et al.* (2010), Pandey & Nagveni (2007), Rana *et al.* (2018), Simkovic *et al.* (2008), Traoré *et al.* (2018) y Varma & Mondal (2016) proponen para la identificación de las biomoléculas de interés para este trabajo dentro de muestras de suelo.

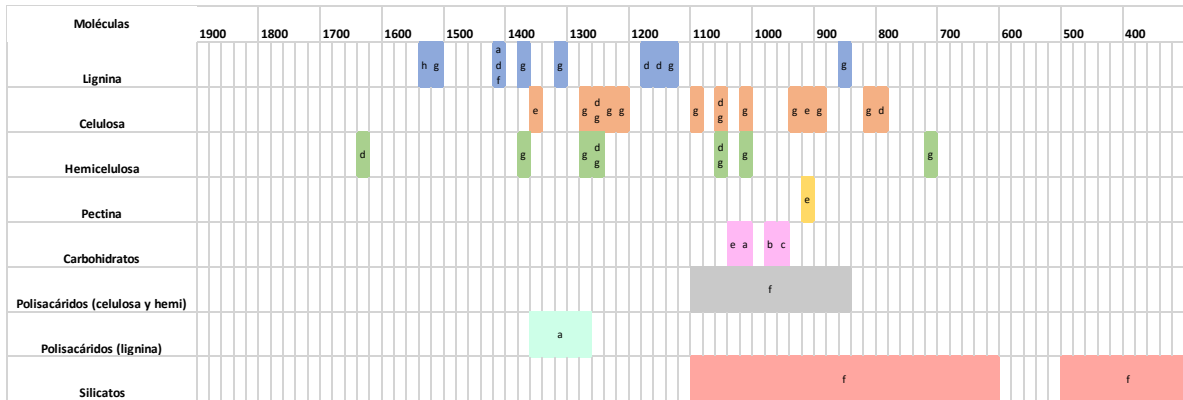


Figura 18. Bandas de absorción asociadas a diferentes moléculas, lignina, celulosa, hemicelulosa, polisacáridos y carbohidratos. ^a(Bui *et al.*, 2015), ^b(Chapman *et al.*, 2001), ^c(Djukic *et al.*, 2010), ^d(Pandey & Nagveni, 2007), ^e(Rana *et al.*, 2018), ^f(Simkovic *et al.*, 2008), ^g(Traoré *et al.*, 2018), ^h(Varma & Mondal, 2016).

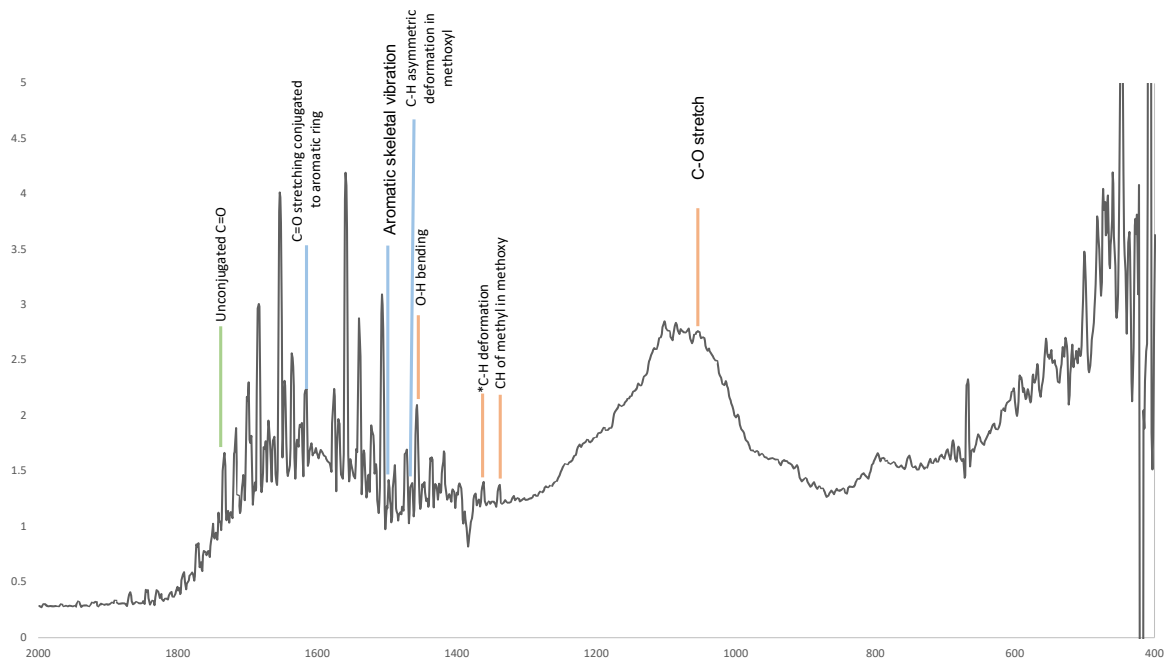


Figura 19. Espectro de referencia con picos asociados a lignina y celulosa. *Banda asociada a hemicelulosa. Las bandas azules están asociadas a lignina, las naranjas a celulosa y las verdes a hemicelulosa.

En el espectro de la Figura 19 podemos encontrar las bandas de C=O, C-H y estructuras aromáticas correspondientes a la lignina. En el caso de la celulosa y la hemicelulosa (líneas verde y naranja) podemos observar los enlaces C=O, O-H y C-H. El espectro muestra corresponde a un sitio con suelo de edad joven con cobertura de bosque analizado en el presente estudio que tiene las bandas más nítidas de los espectros. Es importante la identificación de estas bandas, ya que existen diferencias entre las que aparecen entre un tipo de vegetación y otro, presentándose en mayor proporción las bandas de lignina en muestras de bosque y las de celulosa y hemicelulosa en las muestras de pastizal alpino.

Sánchez–González *et al.*, (2017) muestran algunas bandas asociadas a lignina y celulosa después de realizar un ACP a la MOS encontrando que las bandas 1,653 y 1,462 cm^{-1} están asociadas a lignina las cuales son similares a las bandas 1,632 y 1,457 cm^{-1} presentadas en el presente trabajo; respecto a lignina, (Sánchez–González *et al.*, 2017) reporta las bandas 1,029 y 1,160 cm^{-1} asociadas a celulosa, similares a las reportadas en el presente trabajo (1,020 y 1,166 cm^{-1}).

Esta información es relevante ya que la presencia/ ausencia de algunas bandas proporciona rasgos sobre la huella que va dejando la MOS una vez que se va degradando, información que se complementará en las secciones posteriores.

6.2 Coordenadas

Las coordenadas dentro del CP 1 no muestran un ordenamiento aparente, esto se debe a que este componente concentra una gran proporción de la varianza de las muestras. Como se aprecia en la Figura 7, el pseudo-espectro para el PC 1 tiene el mismo trazo de los correspondientes a los minerales presentes en el suelo (Xu *et al.*, 2014) por lo que podemos asociar este componente a la fracción mineral de las muestras empleadas durante el presente trabajo. Debido a esta particularidad, consideramos que este componente brinda poca información de los detalles presentes en la MOS de cada muestra; por tanto, no representa la

mejor distribución espacial en función de los objetivos de este trabajo. Sin embargo, podría proporcionar información útil para determinar el origen geográfico de la muestra a través del reconocimiento de sus fases minerales o las fases dentro del proceso de neoformación de minerales.¹

Las coordenadas de las muestras analizadas para el CP 2 muestran una separación evidente entre las dos vegetaciones estudiadas. La totalidad de las muestras de pastizal (a excepción de las muestras del Ajusco) se localizaron en la región negativa de este componente sin importar su ubicación. Los valores negativos más altos se obtuvieron para las muestras de pastizal correspondientes a la zona de Cofre de Perote. Esta separación clara entre ambos tipos de cobertura vegetal refuerza la utilidad de los Componentes principales para revelar el origen de la MOS. En el caso de los bosques (región positiva del CP 2) podemos observar que las muestras provenientes de los bosques que crecen sobre los suelos más antiguos son las que poseen los mayores valores positivos.

A lo largo del CP 3, se aprecia una distribución no aleatoria de las muestras de suelo con cobertura de bosque, esta distribución se da en función de la edad de los suelos de las muestras previamente mencionadas. Valores positivos en este componente están relacionados a muestras con suelos de edades menores, llamados bosques jóvenes, mientras que los valores negativos están relacionados con los bosques sobre suelos más viejos. En valores intermedios, cercanos a cero, se distribuyen las muestras con edades intermedias. Esta información se complementa con los resultados obtenidos al analizar las cargas (bandas relevantes) que tiene cada uno de estos componentes.

Las muestras provenientes del Ajusco, que se tomaron bajo la cobertura de pasto, presentan un comportamiento anómalo ya que tienen un espectro con más similitudes con los bosques. Las similitudes con los espectros de los bosques viejos son en las regiones próximas a las bandas 1,100, 1,600 y 3500 cm^{-1} , ya

que presenta un pico de alta intensidad alrededor de los $1,100\text{ cm}^{-1}$, sin embargo, no es tan intenso como en los bosques de mayor edad. Cabe destacar que la intensidad de este pico en los pastos es muy débil. Asimismo, los pastos presentan un pico de gran intensidad alrededor de los $3,500\text{ cm}^{-1}$ siendo las muestras del Ajusco la excepción dentro del grupo de los pastos.

Estas muestras deberían de situarse en la región negativa del CP 2; sin embargo, se sitúan junto con los bosques viejos. La presencia de MOS de bosque dentro de las muestras de estos pastos podrían explicar el porque estas muestras se agrupan junto con los bosques viejos. De acuerdo con Siebe, *et al.* (2016) estas muestras corresponden a sitios de depósito en los cuales se acumuló suelo que probablemente contenga MOS procedente de bosques, lo cual podría verse reflejado en la firma espectral de dichas muestras. Asimismo, el pastizal se instauró en dicha región debido a la tala de la vegetación nativa para usos agrícolas y posterior abandono, lo cual explicaría la presencia de restos de MOS de bosque.

Entre los 26,500 y 20,000 años, se estima que se presentó el máximo avance de los glaciares (Clark *et al.*, 2009), lo cual pudo haber causado modificaciones en la composición de las comunidades vegetales favoreciendo la presencia de especies más tolerantes a las condiciones frías como lo son los pastizales (Caballero *et al.*, 2010), el registro polínico dentro del centro de México presenta un máximo de polen correspondiente a pastos aproximadamente a los 26,000 años, el cual muestra un aumento en la abundancia relativa de esta vegetación sin desplazar a los bosques como especie dominante (Lozano-García & Ortega-Guerrero, 1998), lo cual sugiere la presencia de MOS de pastos dentro de las muestras más viejas dentro de la cronosecuencia estudiada.

Es importante resaltar que las coordenadas de una muestra nos proporcionan información sobre su cobertura vegetal; sin embargo, la asignación a un grupo en particular no dependerá de las coordenadas de la muestra, ya que el análisis

se hizo considerando 4 componentes principales lo que se traduce en un análisis de 4 dimensiones.

Tabla 5. Bandas de interés asociadas a las biomoléculas de interés por CP: lignina (L), hemicelulosa (H), celulosa (C) y complejos organometálicos (CO). En negro se muestran las bandas que se identificaron en la región positiva de cada componente mientras que en rojo las que se encuentran en la región negativa.

CP 1	CP 2	CP 3	CP 4
		807 (H)	
	813 (H)		812 (H)
		891 (C)	
			901 (C)
	962 (L)	964 (L)	
	983 (C)		
		1000 (C)	1003 (C)
			1010 (C)
			1020 (C)
		1044 (CO)	
	1063 (CO)	1061 (CO)	
	1075 (CO)		
1096 (CO)	1096 (CO)		
		1108 (C)	1107 (C)
		1166 (C)	
1315 (C)			1311 (C)
	1332 (C)	1338 (C)	1330 (C)
1341 (C)			
1361 (C)		1361 (C)	
	1384 (C)	1384 (C)	

1421 (L)		1419 (L)	1418 (L)
1456 (L)	1451 (L)	1457 (C)	1457 (L)
	1462 (L)		
	1469 (L)		
	1483 (L)		
	1494 (L)		
1506 (L)	1503 (L)	1503 (L)	1503 (L)
			1507 (L)
	1512 (L)		<u>1518 (H)</u>
1520 (L)		<u>1520 (H)</u>	
			1608 (L)
1615 (L)	1612 (L)	1615 (L)	1612 (L)
			1613 (L)
			1615 (L)
1622 (L)	1620 (L)		
	1632 (L)		1632 (L)
<u>1732 (H)</u>		<u>1732 (H)</u>	<u>1736 (H)</u>
		<u>1738 (H)</u>	<u>1737 (H)</u>
			<u>1740 (H)</u>

De acuerdo con la Tabla 5, las cargas para el PC1 son similares al espectro de referencia por lo que en ellas podemos destacar la presencia de bandas asociadas a la celulosa, lignina y hemicelulosa conforme a la Figura 17.

El PC2 está asociado a los diferentes tipos de cobertura estudiados, es decir, bosques y pastos. Para este componente, se encontraron cargas o bandas asociadas a lignina (1,451, 1,462, 1,469, 1,483, 1,494, 1,503, 1,512, 1,612, 1,620, 1,632 cm^{-1}) para los valores negativos (pastos) de este PC como se puede apreciar en la Tabla 5. Los pastos tienen altas proporciones de celulosa en comparación con la lignina, la celulosa se degrada más rápido durante los procesos de descomposición (Berg & McClaugherty, 2014). La lignina es

considerada como una biomolécula altamente resistente a la degradación (Kögel-Knabner, 2002) por ello es muy probable que la huella espectral de la lignina se vea reflejada en la vegetación/cobertura de pasto debido a que la celulosa se ha consumido en mayor medida haciendo que la firma de esta biomolécula no sea evidente.

De acuerdo con la información que proporcionan las cargas para las muestras analizadas, el PC 3 está asociado a la edad de los suelos sobre los que crecen los bosques. Para los bosques en suelos jóvenes (valores positivos), se encontraron bandas o cargas asociadas a la lignina ($1,419, 1,615 \text{ cm}^{-1}$). Durante el proceso de descomposición de la hojarasca, la lignina es preservada y acumulada en concentración durante las primeras etapas de este proceso (Berg & Staaf, 1980), por ello es de esperar que los espectros correspondientes a bosques en suelos más jóvenes aún tengan rasgos de esta biomolécula. Para valores negativos para este CP, donde se sitúan los bosques desarrollados en suelos de edades intermedias y viejas, la presencia de cargas entre los $1,040$ y $1,100 \text{ cm}^{-1}$ asociadas a enlaces SiO-C y Si-O-S sugieren la presencia de compuestos órganominerales, es decir; asociación de compuestos orgánicos con minerales de bajo orden estructural, lo cual puede ser un indicador en la evolución de la MOS al encontrarla en suelos volcánicos más desarrollados. De acuerdo con los resultados de Peña-Ramírez (2013) en el análisis de Al, Si y Fe extraído con pirofosfato de sodio (metales asociados a la MOS) se puede observar un aumento en la concentración de estos elementos al extraerlos con pirofosfatos. Esto sugiere que la MOS del suelo se estabiliza y acumula al formar este tipo de compuestos. También se observó que el Al, Si y Fe extraídos con oxalato de amonio (asociados con el contenido de estos elementos en minerales de bajo orden estructural) presentan un crecimiento lineal durante los primeros 10, 000 años, disminuyendo progresivamente hacia los 100, 000 años. Asimismo, la concentración de Al y Fe con pirofosfato mostró una tendencia a aumentar con el tiempo.

Las cargas asociadas al CP3 refuerzan la idea de este componente como un indicador del grado de desarrollo de estos suelos como indicador de la edad de los suelos estudiados, ya que los suelos con cobertura de bosque más viejos se sitúan en la parte negativa de este componente. La lignina es un indicador para los bosques jóvenes mientras que en los bosques sobre suelos viejos dominan los complejos órganominerales.

Para el CP 4, las cargas encontradas están asociadas a la celulosa (901, 1,003, 1,010, 1,020, 1,311, 1,330 cm^{-1}). De acuerdo con lo discutido previamente, es de esperarse que la celulosa al ser una molécula con menor estabilidad no presente rasgos en los primeros componentes principales, pero sí en los componentes sucesivos que muestran mayores detalles de los espectros.

6.3 Muestras problema

A partir de la Figura 11 podemos observar que los espectros de las muestras problema dentro de la cronosecuencia presentan un patrón similar, siendo la región entre los 900 y 1,200 cm^{-1} donde se aprecian las diferencias más evidentes dentro de estos espectros.

Debido a las dificultades para encontrar diferencias entre los espectros analizados, es necesario el uso de diversos métodos estadísticos (ACP y CBM) que nos proporcionen información de los detalles que tienen los espectros.

6.3.1 Muestras control

Las muestras control que corresponden a vegetaciones de matorral y cultivo, tienen coordenadas cercanas al origen para el PC2 y PC3, como se aprecia en la Figura 13. Esto sugiere que la información extraída de los PCA para estas muestras no está completamente relacionada a ninguno de los dos grandes grupos de vegetación estudiados y por ello las coordenadas asignadas a estas

muestras están cercanas al origen para cada uno de los CP analizados comprobando así la estabilidad del modelo construido.

6.4 Probabilidades

6.4.1 Muestras problema dentro de la cronosecuencia de Peña-Ramírez, 2013

Para determinar de manera numérica a que grupo pertenece cada una de las muestras problemas se determinó la probabilidad que tiene cada muestra de pertenecer a cada uno de los grupos arrojados por la CBM. Si bien, la posición que guardan las coordenadas de cada una de las muestras analizadas nos proporciona información sobre la vegetación que dio origen a la MOS en cada una de ellas, la asignación a un grupo en específico no dependerá de esto, ya que el análisis realizado contempla 4 dimensiones y las gráficas empleadas son en un plano.

Las probabilidades asignadas para cada una de las muestras se encuentran entre el 64 y mayoritariamente cercana al 100 %, siendo asignado el valor más bajo una muestra correspondiente al sitio Malacatépetl. Estos valores sugieren que el modelo asigna de manera contundente cada una de las muestras estudiadas a un grupo en específico, con ello es posible realizar una reconstrucción de la cobertura vegetal presente dentro de la cronosecuencia analizada a pesar de la proximidad que tienen todas las muestras problema entre sí como se observa en la Figura 14. Los resultados muestran que en la totalidad de muestras pertenecientes a la cronosecuencia presentaron una cobertura correspondiente a bosque, lo que sugiere que al menos durante los últimos 30,000 años, fecha de la muestra con mayor edad, la vegetación imperante en el sitio desde hace 30,000 años ha sido el bosque alpino, tal y como lo sugiere (Lozano-García & Ortega-Guerrero, 1998).

6.4.2 Muestras control

Estas muestras se incluyeron para evaluar la estabilidad del modelo al tener coberturas que no estaban consideradas en el modelo que se empleó para el cálculo de las probabilidades. La distribución de estas muestras a lo largo de los CP 2 y 3 es cercana al origen como se aprecia en la Figura 17. Atribuimos este hecho a que el modelo no contiene información para esa vegetación y por ello las agrupa cerca del cero para ambos componentes. Debido a la naturaleza del modelo, éste está obligado a asignar una probabilidad de pertenecer a alguno de los grupos formados mediante la CBM.

Las probabilidades para este grupo de muestras oscilaron entre el 56 y el 100 %. Como se aprecia en la tabla 3, la asignación de estas muestras a un grupo en particular no es tan clara. Por ejemplo, las muestras correspondientes al Valle del Mezquital corresponden a parcelas de cultivo de maíz con rotación temporal de pasto y alfalfa en las últimas décadas. Se esperaría que la firma espectral encontrada dentro de las muestras fuera similar a la de los pastizales, a pesar de la presencia de lignina en la alfalfa, por la mayor proporción de celulosa derivada de la cobertura de maíz y pasto. Por su parte, las muestras de matorral tienden a agruparse dentro de los grupos de bosque, lo cual es coherente de acuerdo con el tipo de estructuras rígidas por el contenido de lignina en las raíces que contienen ambos tipos de cobertura.

6.5 Acumulación de compuestos derivados de lignina

Como se ha mencionado previamente, la lignina es un compuesto más resistente a la degradación respecto a la celulosa (Lützow *et al.*, 2006), por lo cual se esperaría que la proporción de compuestos derivados de la lignina fuera mayor en suelos conforme avanza la pedogénesis y la MOS es más vieja. Talbot & Treseder, (2012) encontraron que suelos con detritos provenientes de plantas con menor cantidad de celulosa presentaron una pérdida mayor a esta molécula,

lo que indica la preferencia de los descomponedores a la celulosa respecto a la lignina. Hall *et al.*, (2020) mediante incubaciones de suelo de bosque con detritos de pasto demostraron que la tasa de degradación de la lignina nunca fue mayor a la tasa de descomposición del carbono orgánico del suelo, lo cual sugiere una acumulación en el tiempo de esta molécula en el tipo.

Esta característica (acumulación de lignina) debería ser visible dentro de los espectros IR, sin importar el origen vegetal de la MOS, por lo que se esperaría que espectros IR correspondientes a sitios de mayor edad se asemejaran en mayor medida a los espectros correspondientes a los suelos viejos bajo cobertura boscosa analizados en el presente estudio, al ser muestras con MOS procedente de una cobertura vegetal rica en lignina. Lo anterior pudiera ser estudiado mediante el análisis de horizontes superficiales suelos de origen de volcánicos bajo cualquier tipo de cobertura datados para observar el comportamiento de la MOS

6.6 Reconstrucción de la línea de árboles

El límite del estrato arbóreo en las zonas altas de México es sensible al cambio de temperatura (Astudillo,2017). El último máximo glacial ocurrió aproximadamente hace 26,500 y 20,000 años. (Clark *et al.*, 2009), tiempo que se caracterizó por la mayor glaciación sobre los continentes (Hughes, 1983). Derivado de este cambio en el clima, ocurrieron distintos cambios notables en la vegetación (Müller, 2003).

La cronosecuencia analizada cuenta con suelos con edades entre los 1,835 y 30,000 años, por lo que se esperaba encontrar evidencia de vegetación correspondiente a pastizal alpino derivado del descenso en la temperatura a escala global. Sin embargo, los resultados obtenidos corresponden a vegetación de bosque alpino a lo largo de toda la cronosecuencia por lo cual no se pudo establecer si existió otra línea de árboles diferente al actual resultado de la

migración de la vegetación como respuesta a los cambios en el clima que se presentaron en el periodo de estudio. De acuerdo con Caballero *et al*, (2010), conforme a los datos del análisis polínico y el registro glaciar durante la última glaciación hace 30,000 años y hasta hace 16,000-14,000 años, la línea de árboles se situó 1,000 m por debajo de la línea actual, resultado de un descenso en la temperatura del orden de 6 a 7.5 °C (Lachniet & Vazquez-Selem, 2005), provocando el desplazamiento de la vegetación alpina a altitudes menores. Sin embargo, la magnitud de dicho enfriamiento aún no está clara (Metcalf *et al.*, 2000) existiendo discrepancias entre valores altos correspondientes a un descenso de 6 a 7 °C (Lachniet & Vazquez-Selem, 2005) y un descenso menor comprendido entre 1 y 2 °C (Brunner, 1982). La dificultad para cuantificar el descenso de la temperatura durante este periodo se debe a la alta actividad volcánica registrada, la cual puede ser la responsable del cambio en la vegetación y no el clima (Lozano-García & Ortega-Guerrero, 1998).

De acuerdo con el presente estudio, la vegetación presente durante los últimos 30,000 años dentro de la Cuenca del Chichinautzin ha sido de bosque alpino. Debido a la sensibilidad que presenta el ecotono a la temperatura no podemos aseverar que las evidencias del presente trabajo sean concluyentes, para ello se requerirá realizar estudios complementarios como el análisis de polen dentro de las muestras estudiadas.

Capítulo 7

Conclusiones

La espectroscopía de infrarrojo en conjunto con el análisis de componentes principales mostró ser una herramienta útil para el análisis de la MOS en horizontes de suelo superficiales y sepultados. Esta técnica separa las muestras de horizontes de suelo superficiales en función de la vegetación presente durante la formación de estos horizontes.

El ACP mostró patrones asociados a los diferentes tipos de cobertura vegetal estudiados y una clara diferencia entre las coordenadas de ambos (bosque y pasto). Así mismo, el ACP mostró grupos específicos para cada una de las coberturas estudiadas.

Las diferencias en las cargas de las vegetaciones estudiadas muestran la importancia que tienen los diferentes tipos de residuos orgánicos dentro de la MOS. Por tanto, se demostró la influencia de los diferentes desechos vegetales que dan origen a la MOS en su composición, quedando reflejadas estas diferencias en bandas características dentro del espectro

Los resultados obtenidos al introducir diferentes coberturas a las del modelo, sugieren que este agrupa de manera adecuada las muestras en función de la vegetación presente, al asignar estas muestras a la vegetación más parecida en función de las moléculas que componen la estructura de cada una de ellas, ya sea lignina o celulosa.

El método empleado durante el presente trabajo presentó una tendencia importante al agruparse las muestras en función de la edad del suelo en el ACP. Esto se debe al cambio en la composición mineralógica en el suelo conforme transcurre el tiempo. Dichos cambios se ven reflejados en algunas bandas

espectrales ($1040-1100\text{ cm}^{-1}$) que están asociadas a la formación de complejos órgano-minerales.

El presente estudio no permitió identificar la línea de árboles dentro de la cronosecuencia analizada. Esto puede deberse a que no existió un cambio de cobertura dentro de la zona de estudio durante los últimos 30,000 años o bien pudo deberse a un error en la elección en el objeto de estudio ya que no se incorporaron al modelo muestras con una combinación de ambas vegetaciones estudiadas que marcarían el ecotono dentro del gradiente altitudinal. Para estudios posteriores se recomienda incorporar muestras de horizontes con estas características o bien realizar un ensayo de laboratorio para determinar la firma espectral que contienen las muestras presentes en el ecotono e incorporar estos espectros al modelo para hacerlo más robusto.

Capítulo 8

Bibliografía

- Abbas, O., Rebufa, C., Dupuy, N., Permanyer, A., & Kister, J. (2012). PLS regression on spectroscopic data for the prediction of crude oil quality: API gravity and aliphatic/aromatic ratio. *Fuel*, *98*, 5–14.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.03.045>
- Abdel-Fattah, M. K., Mohamed, E. S., Wagdi, E. M., Shahin, S. A., Aldosari, A. A., Lasaponara, R., & Alnaimy, M. A. (2021). Quantitative Evaluation of Soil Quality Using Principal Component Analysis: The Case Study of El-Fayoum Depression Egypt. *Sustainability*, *13*(4). <https://doi.org/10.3390/su13041824>
- Almeida-Lenero, L., Giménez de Azcárate, J., Cleef, A. M., & Gonzales Trapaga, A. (2004). Las comunidades vegetales del zacatonal alpino de los Volcanes Popocatepetl y Nevado de Toluca, Región Central de México. *Phytocoenologia*, *34*(1), 91–132.
- Astudillo-Sánchez, C. C., Villanueva-Díaz, J., Endara-Agramont, A. R., Nava-Bernal, G. E., & Gómez-Albores, M. Á. (2017). Influencia climática en el reclutamiento de *Pinus hartwegii* Lindl. del ecotono bosque-pastizal alpino en Monte Tláloc, México. *Agrociencia*, *51*(1), 105–118.
- Austin, A. T., & Ballaré, C. L. (2010). Dual role of lignin in plant litter decomposition in terrestrial ecosystems. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *107*(10), 4618–4622.
<https://doi.org/10.1073/pnas.0909396107>
- Beattie, J. R., & Esmonde-White, F. W. L. (2021). Exploration of Principal Component Analysis: Deriving Principal Component Analysis Visually Using Spectra. *Applied Spectroscopy*, *75*(4), 361–375.
<https://doi.org/10.1177/0003702820987847>
- Berg, B., & Staaf, H. (1980). Decomposition Rate and Chemical Changes of Scots Pine Needle Litter. II. Influence of Chemical Composition. *Ecological Bulletins*, *32*, 373–390.

- <http://www.jstor.org.pbidi.unam.mx:8080/stable/20112825>
- Besoain, E. (1969). Imogolite in volcanic soils of Chile. *Geoderma*, 2(2), 151–169. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0016-7061\(69\)90020-2](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0016-7061(69)90020-2)
- Besoain, E. (1974). Consideraciones generales sobre la formación de minerales secundarios en los andosoles esquema de una secuencia de meteorización de las cenizas volcánicas. *Anales de Edafología y Agrobiología*, 32, 343–357.
- Besoain, E. (1985). Minerales de arcillas de suelos. *Instituto Interamericano de Cooperación Para La Agricultura*, 1205.
- Bombalska, A., Mularczyk-Oliwa, M., Kwaśny, M., Włodarski, M., Kaliszewski, M., Kopczyński, K., Szpakowska, M., & Trafny, E. A. (2011). Classification of the biological material with use of FTIR spectroscopy and statistical analysis. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 78(4), 1221–1226. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.saa.2010.10.025>
- Brady, N. C., Weil, R. R., & Weil, R. R. (2008). *The nature and properties of soils* (Vol. 13). Prentice Hall Upper Saddle River, NJ.
- Broderick, S. R., Suh, C., Provine, J., Roper, C. S., Maboudian, R., Howe, R. T., & Rajan, K. (2012). Application of principal component analysis to a full profile correlative analysis of FTIR spectra. *Surface and Interface Analysis*, 44(3), 365–371. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/sia.3813>
- Brunner, C. A. (1982). Paleoceanography of surface waters in the Gulf of Mexico during the late Quaternary. *Quaternary Research*, 17(1), 105–119. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0033-5894\(82\)90048-5](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0033-5894(82)90048-5)
- Bui, N. Q., Fongarland, P., Rataboul, F., Dartiguelongue, C., Charon, N., Vallée, C., & Essayem, N. (2015). FTIR as a simple tool to quantify unconverted lignin from chars in biomass liquefaction process: Application to SC ethanol liquefaction of pine wood. *Fuel Processing Technology*, 134, 378–386. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2015.02.020>
- Caballero, M., Lozano-García, S., Vázquez-Selem, L., & Ortega, B. (2010). Evidencias de cambio climático y ambiental en registros glaciales y en

- cuencas lacustres del centro de México durante el último máximo glacial. *Boletín de La Sociedad Geológica Mexicana*, 62(3), 359–377.
- Camarero, J. J., Linares, J. C., García-Cervigón, A. I., Batllori, E., Martínez, I., & Gutiérrez, E. (2017). Back to the Future: The Responses of Alpine Treelines to Climate Warming are Constrained by the Current Ecotone Structure. *Ecosystems*, 20(4), 683–700. <https://doi.org/10.1007/s10021-016-0046-3>
- Cano-Santana, Z., I. Pisanty, S. Segura, P.E. Mendoza-Hernández, R. León-Rico, J. Soberón, E. Tovar, E. Martínez-Romero, L.C. Ruíz y A. Martínez-Ballesté. 2006. Ecología, conservación, restauración y manejo de las áreas naturales y protegidas del Pedregal del Xitle.
- Carrasco-Núñez, G., Díaz-Castellón, R., Siebert, L., Hubbard, B., Sheridan, M. F., & Rodríguez, S. R. (2006). Multiple edifice-collapse events in the Eastern Mexican Volcanic Belt: The role of sloping substrate and implications for hazard assessment. *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 158(1), 151–176. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2006.04.025>
- Carrasco-Núñez, G., & Nelson, S. (1998). *Edad y tasa de crecimiento del volcán Cofre de Perote (resumen)*, *Primera Reunión Nacional de Ciencias de la Tierra*.
- Catt, J. (1991). Holocene book reviews : Soils of the past: an introduction to palaeopedology: G.J. Retallack. London: Unwin Hyman, 1990, 520 pp, £24.95 paperback. ISBN 004-445757-X. *The Holocene*, 1(2), 182–183. <https://doi.org/10.1177/095968369100100214>
- Chadwick, O. A., & Chorover, J. (2001). The chemistry of pedogenic thresholds. *Geoderma*, 100(3), 321–353. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0016-7061\(01\)00027-1](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0016-7061(01)00027-1)
- Chapman, S. J., Campbell, C. D., Fraser, A. R., & Puri, G. (2001). FTIR spectroscopy of peat in and bordering Scots pine woodland: relationship with chemical and biological properties. *Soil Biology and Biochemistry*, 33(9), 1193–1200. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0038-0717\(01\)00023-2](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0038-0717(01)00023-2)

- Ciarkowska, K., Sołek-Podwika, K., Filipek-Mazur, B., & Tabak, M. (2017). Comparative effects of lignite-derived humic acids and FYM on soil properties and vegetable yield. *Geoderma*, 303, 85–92.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.05.022>
- Clark, P. U., Dyke, A. S., Shakun, J. D., Carlson, A. E., Clark, J., Wohlfarth, B., Mitrovica, J. X., Hostetler, S. W., & McCabe, A. M. (2009). The Last Glacial Maximum. *Science*, 325(5941), 710–714.
<https://doi.org/10.1126/science.1172873>
- Davis, W. M., Erickson, C. L., Johnston, C. T., Delfino, J. J., & Porter, J. E. (1999). Quantitative Fourier Transform Infrared spectroscopic investigation humic substance functional group composition. *Chemosphere*, 38(12), 2913–2928. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(98\)00486-X](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0045-6535(98)00486-X)
- Djukic, I., Zehetner, F., Tatzber, M., & Gerzabek, M. H. (2010). Soil organic-matter stocks and characteristics along an Alpine elevation gradient. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*, 173, 30–38.
<https://doi.org/10.1002/jpln.200900027>
- Dupuy, N., & Douay, F. (2001). Infrared and chemometrics study of the interaction between heavy metals and organic matter in soils. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 57(5), 1037–1047. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1386-1425\(00\)00420-0](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1386-1425(00)00420-0)
- Eswaran, H., & Reich, P. F. (2005). *WORLD SOIL MAP* (D. B. T.-E. of S. in the E. Hillel (ed.); pp. 352–365). Elsevier.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B0-12-348530-4/00019-9>
- Eswaran, Hari, Van Den Berg, E., & Reich, P. (1993). Organic Carbon in Soils of the World. *Soil Science Society of America Journal*, 57(1), 192–194.
- Ferrari, L. (2000). Avances en el conocimiento de la Faja Volcánica Transmexicana durante la última década. *Boletín de La Sociedad Geológica Mexicana*, 8, 84–92.
- Ferrusquía-Villafranca, I., Arroyo-Cabrales, J., Martínez-Hernández, E., Gama-Castro, J., Ruiz-González, J., Polaco, O. J., & Johnson, E. (2010).

- Pleistocene mammals of Mexico: A critical review of regional chronofaunas, climate change response and biogeographic provinciality. *Quaternary International*, 217(1), 53–104.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.quaint.2009.11.036>
- Galván, E. (2016). *Impacto de las zanjas trincheras sobre la calidad del suelo en laderas medias del Parque Nacional Iztaccíhuatl-Popocatepetl*.
- Gewers, F. L., Ferreira, G. R., de Arruda, H. F., Silva, F. N., Comin, C. H., Amancio, D. R., & Costa, L. da F. (2018). *Principal Component Analysis: A Natural Approach to Data Exploration*. <https://doi.org/10.1145/3447755>
- Gleixner, G., Poirier, N., Bol, R., & Balesdent, J. (2002). Molecular dynamics of organic matter in a cultivated soil. *Organic Geochemistry*, 33(3), 357–366.
[https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0146-6380\(01\)00166-8](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0146-6380(01)00166-8)
- Haberhauer, G., Feigl, B., Gerzabek, M. H., & Cerri, C. (2000). FT-IR Spectroscopy of Organic Matter in Tropical Soils: Changes Induced through Deforestation. *Appl. Spectrosc.*, 54(2), 221–224.
<http://opg.optica.org/as/abstract.cfm?URI=as-54-2-221>
- Haberhauer, G., & Gerzabek, M. H. (1999). Drift and transmission FT-IR spectroscopy of forest soils: an approach to determine decomposition processes of forest litter. *Vibrational Spectroscopy*, 19(2), 413–417.
[https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0924-2031\(98\)00046-0](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0924-2031(98)00046-0)
- Hughes, O. (1983). Quaternary geology, Yukon territory and western district of Mackenzie. *Glaciation. University of Alaska, Fairbanks, Alaska Quaternary Center*, 51–56.
- Jolliffe, I. T. (1993). Principal component analysis: A beginner's guide — II. Pitfalls, myths and extensions. *Weather*, 48(8), 246–253.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1002/j.1477-8696.1993.tb05899.x>
- Juneja, A., Kumar, D., Williams, J., Wysocki, D., & Murthy, G. (2011). Potential for ethanol production from conservation reserve program lands in Oregon. *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, 3.
<https://doi.org/10.1063/1.3658399>
- Kayler, Z. E., Kaiser, M., Gessler, A., Ellerbrock, R. H., & Sommer, M. (2011).

- Application of $\delta^{13}\text{C}$ and $\delta^{15}\text{N}$ isotopic signatures of organic matter fractions sequentially separated from adjacent arable and forest soils to identify carbon stabilization mechanisms. *Biogeosciences*, 8(10), 2895–2906. <https://doi.org/10.5194/bg-8-2895-2011>
- Kelleher, B. P., & Simpson, A. J. (2006). Humic substances in soils: are they really chemically distinct? *Environmental Science & Technology*, 40(15), 4605–4611. <https://doi.org/10.1021/es0608085>
- Kleber, M. (2010). What is recalcitrant soil organic matter? *Environmental Chemistry*, 7(4), 320–332.
- Koch, G. W., Sillett, S. C., Jennings, G. M., & Davis, S. D. (2004). The limits to tree height. *Nature*, 428(6985), 851–854.
- Kögel-Knabner, I. (2002). The macromolecular organic composition of plant and microbial residues as inputs to soil organic matter. *Soil Biology and Biochemistry*, 34(2), 139–162. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0038-0717\(01\)00158-4](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0038-0717(01)00158-4)
- Kupfer, J. A., & Cairns, D. M. (1996). The suitability of montane ecotones as indicators of global climatic change. *Progress in Physical Geography: Earth and Environment*, 20(3), 253–272. <https://doi.org/10.1177/030913339602000301>
- Lachniet, M. S., & Vazquez-Selem, L. (2005). Last Glacial Maximum equilibrium line altitudes in the circum-Caribbean (Mexico, Guatemala, Costa Rica, Colombia, and Venezuela). *Quaternary International*, 138–139, 129–144. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.quaint.2005.02.010>
- Lozano, S. (1996). La vegetación Cuaternaria en el Centro de México: Registros Palinológicos e Implicaciones Paleoclimáticas. *Boletín de La Sociedad Botánica de México*, 58, 113–127. <https://doi.org/10.17129/botsoci.1492>
- Lozano-García, M., & Ortega-Guerrero, B. (1998). Late Quaternary environmental changes of the central part of the Basin of Mexico; correlation between Texcoco and Chalco basins. *Review of Palaeobotany and Palynology*, 99(2), 77–93. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0034-6667\(97\)00046-8](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0034-6667(97)00046-8)

- Lützow, M. v, Kögel-Knabner, I., Ekschmitt, K., Matzner, E., Guggenberger, G., Marschner, B., & Flessa, H. (2006). Stabilization of organic matter in temperate soils: mechanisms and their relevance under different soil conditions—a review. *European Journal of Soil Science*, 57(4), 426–445.
- Márquez, A. (1998). *Relaciones tectovolcánicas en el centro del Cinturón Volcánico Mexicano: El campo volcánico de Sierra Chichinautzin*. Doctoral thesis. Universidad Complutense de Madrid.
- Mendoza-Hernández, P.E.2013. Comunidades sintéticas para la restauración sucesional del bosque de encino y el matorral xerófilo del Ajusco Medio, Distrito Federal, México. Tesis de doctorado. Posgrado de Ciencias Biológicas, Instituto de Ecología, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F., México
- Metcalf, S. E., O'Hara, S. L., Caballero, M., & Davies, S. J. (2000). Records of Late Pleistocene–Holocene climatic change in Mexico — a review. *Quaternary Science Reviews*, 19(7), 699–721.
[https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0277-3791\(99\)00022-0](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0277-3791(99)00022-0)
- Miehlich, G. (1991). *Chronosequences of Volcanic Ash Soils*. IFB.
<https://books.google.com.mx/books?id=78xOAQAIAAJ>
- Mizota, C and Van Reeuwijk, L. and others. (1989). Clay mineralogy and chemistry of soils formed in volcanic material in diverse climatic regions. {Mizota, C and Van Reeuwijk, LP and others}, journal={Clay mineralogy and chemistry of soils formed in volcanic material in diverse climatic regions.}, number={. *Clay Mineralogy and Chemistry of Soils Formed in Volcanic Material in Diverse Climatic Regions*.
- Morona, F., Melquíades, F. L., & Muller, M. M. L. (2017). Quantification of Organic Matter in Agricultural Soils from the Central Region of Paraná State, Brazil. *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, 48(19), 2288–2293. <https://doi.org/10.1080/00103624.2017.1411505>
- Myster, R. W. (2012). *Ecotones Between Forest and Grassland*. Springer, New York, NY.
- Naumann, A., Heine, G., & Rauber, R. (2010). Efficient discrimination of oat and

- pea roots by cluster analysis of Fourier transform infrared (FTIR) spectra. *Field Crops Research*, 119(1), 78–84.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.fcr.2010.06.017>
- Niu, C., Qing, W., Chen, H., Wang, K., Yuan, X., & Zhang, Y. (2011). Application of principal component analysis and cluster analysis to evaluation of black soil degradation in Jilin. *2011 International Conference on Multimedia Technology*, 1467–1470. <https://doi.org/10.1109/ICMT.2011.6003340>
- Osman, K. T. (2012). *Soils: principles, properties and management*. Springer Science & Business Media.
- Pandey, K., & Nagveni, H. (2007). Rapid characterisation of brown and white rot degraded chir pine and rubberwood by FTIR spectroscopy. *Holz Als Roh- Und Werkstoff*, 65, 477–481. <https://doi.org/10.1007/s00107-007-0181-9>
- Peña-Ramírez, V. M. (2013). *Dinámica de la calidad de sitio a través de una cronosecuencia volcánica y sus implicaciones para la productividad forestal*. Universidad Autónoma de México.
- Peña-Ramírez, V., Vázquez-Selem, L., & Siebe, C. (2015). Rates of pedogenic processes in volcanic landscapes of late Pleistocene to Holocene age in Central Mexico. *Quaternary International*, 376, 19–33.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.quaint.2014.11.032>
- Picariello, E., Baldantoni, D., Izzo, F., Langella, A., & De Nicola, F. (2021). Soil organic matter stability and microbial community in relation to different plant cover: A focus on forests characterizing Mediterranean area. *Applied Soil Ecology*, 162, 103897.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.apsoil.2021.103897>
- Pilatowski, R. (2015). *Composición y variabilidad de la materia orgánica sólida en suelos agrícolas regados con agua residual cruda. Tesis de licenciatura*.
- Rana, R., Herz, K., Bruelheide, H., Dietz, S., Haider, S., Jandt, U., & Pena, R. (2018). Leaf Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared (ATR-FTIR) biochemical profile of grassland plant species related to land-use intensity. *Ecological Indicators*, 84, 803–810.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2017.09.047>

- Ristori, G. G., Sparvoli, E., de Nobili, M., & D'Acqui, L. P. (1992). Characterization of organic matter in particle-size fractions of Vertisols. *Geoderma*, 54(1), 295–305. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0016-7061\(92\)90111-J](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0016-7061(92)90111-J)
- Rzedowski, J. (2006). Vegetación de México. 1ra. Edición Digital, Comisión Nacional Para El Conocimiento y Uso de La Biodiversidad, México, 504.
- Sánchez–González, A., Chapela–Lara, M., Germán–Venegas, E., Fuentes-García, R., Río-Portilla, F. del, & Siebe, C. (2017). Changes in quality and quantity of soil organic matter stocks resulting from wastewater irrigation in formerly forested land. *Geoderma*, 306, 99–107. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.07.009>
- Schmidt, M. W. I., Torn, M. S., Abiven, S., Dittmar, T., Guggenberger, G., Janssens, I. A., Kleber, M., Kögel-Knabner, I., Lehmann, J., Manning, D. A. C., Nannipieri, P., Rasse, D. P., Weiner, S., & Trumbore, S. E. (2011). Persistence of soil organic matter as an ecosystem property. *Nature*, 478(7367), 49–56. <https://doi.org/10.1038/nature10386>
- Scholes, M. C., Powlson, D., & Tian, G. (1997). Input control of organic matter dynamics. *Geoderma*, 79(1), 25–47. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0016-7061\(97\)00037-2](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0016-7061(97)00037-2)
- Schwarz, W. (2001). The cellulosome and cellulose degradation by anaerobic bacteria. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 56(5), 634–649. <https://doi.org/10.1007/s002530100710>
- Settle, M. (1979). The structure and emplacement of cinder cone fields. *American Journal of Science*, 279, 1089–1107.
- Shrestha, R. K., & Lal, R. (2010). Carbon and nitrogen pools in reclaimed land under forest and pasture ecosystems in Ohio, USA. *Geoderma*, 157(3), 196–205. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2010.04.013>
- Siebe, C., P. E. Mendoza-Hernández, S. Juárez-Orozco, L. Vázquez-Selem y S. Cram. 2016. Consecuencias de la actividad volcánica del Xitle y el disturbio antrópico sobre las propiedades del suelo y la diversidad vegetal del Parque Ecológico de la Ciudad de México en el Ajusco Medio. En: “La

- Biodiversidad en la Ciudad de México: Estudio de Estado” (Capítulo 2 : Marco Físico, Social y Cultural). Gobierno de la Ciudad de México, la Dirección General de Zoológicos y Vida Silvestre (DGZVS), y la Comisión para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad (CONABIO).
- Simkovic, I., Dlapa, P., Doerr, S. H., Mataix-Solera, J., & Sasinkova, V. (2008). Thermal destruction of soil water repellency and associated changes to soil organic matter as observed by FTIR spectroscopy. *CATENA*, 74(3), 205–211. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.catena.2008.03.003](https://doi.org/10.1016/j.catena.2008.03.003)
- Sjöström, E. (1993). *Wood chemistry: fundamentals and applications*, Academic Press. San Diego, CA.[*Google Scholar*].
- Targulian, V O, & Bronnikova, M. A. (2019). Soil Memory: Theoretical Basics of the Concept, Its Current State, and Prospects for Development. *Eurasian Soil Science*, 52(3), 229–243. <https://doi.org/10.1134/S1064229319030116>
- Targulian, Victor O., & Goryachkin, S. V. (2004). Soil memory: Types of record, carriers, hierarchy and diversity. *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, 21(1), 1–8.
- Teong, I. T., Felix, N. L. L., Mohd, S., & Sulaeman, A. (2016). Characterization of soil organic matter in peat soil with different humification levels using FTIR. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 136(1), 12010.
- Traoré, M., Kaal, J., & Cortizas, A. (2018). Differentiation between pine woods according to species and growing location using FTIR-ATR. *Wood Science and Technology*, 52. <https://doi.org/10.1007/s00226-017-0967-9>
- Van Bergen, P. F., Collison, M. E., Briggs, D. E. G., De Leeuw, J. W., Scott, A. C., Evershed, R. P., & Finch, P. (1995). Resistant biomacromolecules in the fossil record1. *Acta Botanica Neerlandica*, 44(4), 319–342. [https://doi.org/https://doi.org/10.1111/j.1438-8677.1995.tb00791.x](https://doi.org/10.1111/j.1438-8677.1995.tb00791.x)
- Vancampenhout, K., Wouters, K., Caus, A., Buurman, P., Swennen, R., & Deckers, J. (2008). Fingerprinting of soil organic matter as a proxy for assessing climate and vegetation changes in last interglacial palaeosols (Veldwezelt, Belgium). *Quaternary Research*, 69(1), 145–162.

<https://doi.org/10.1016/j.yqres.2007.09.003>

- Varma, A. K., & Mondal, P. (2016). *Thermochemical Characterization of Pine Needles as a Potential Source of Energy BT - Proceedings of the First International Conference on Recent Advances in Bioenergy Research* (S. Kumar, S. K. Khanal, & Y. K. Yadav (eds.); pp. 257–265). Springer India.
- Wang, L., Zhang, J., He, R., Chen, Y., Yang, L., Zheng, H., Li, H., Xiao, J., & Liu, Y. (2018). Impacts of soil fauna on lignin and cellulose degradation in litter decomposition across an alpine forest-tundra ecotone. *European Journal of Soil Biology*, *87*, 53–60.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ejsobi.2018.05.004>
- Wang, S., Xu, X., Shrestha, N., Zimmermann, N. E., Tang, Z., & Wang, Z. (2017). Response of spatial vegetation distribution in China to climate changes since the Last Glacial Maximum (LGM). *PLOS ONE*, *12*(4), e0175742. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0175742>
- Warren, J., & Ziegler, S. E. (2017). A solid phase extraction method for isolating HF-extractable soil organic matter for NMR analysis. *Organic Geochemistry*, *111*, 1–8.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.orggeochem.2017.04.012>
- White, S. E., & Valastro, S. (1984). Pleistocene glaciation of volcano Ajusco, central Mexico, and comparison with the standard Mexican glacial sequence. *Quaternary Research*, *21*(1), 21–35.
[https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0033-5894\(84\)90086-3](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0033-5894(84)90086-3)
- Wiesheu, A. C., Brejcha, R., Mueller, C. W., Kögel-Knabner, I., Elsner, M., Niessner, R., & Ivleva, N. P. (2018). Stable-isotope Raman microspectroscopy for the analysis of soil organic matter. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, *410*(3), 923–931. <https://doi.org/10.1007/s00216-017-0543-z>
- Xu, B. (1), Ding, S. (1), & Cheng, H. (2). (2014). The translation mechanism of smectite to illite: An infrared spectroscopic study of ordered mixed-layer illite/smectite. *Spectroscopy Letters*, *47*(7), 543–548.
<https://doi.org/10.1080/00387010.2013.821134>

Zaccheo, P., Cabassi, G., Ricca, G., & Crippa, L. (2002). Decomposition of organic residues in soil: experimental technique and spectroscopic approach. *Organic Geochemistry*, 33(3), 327–345.

[https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0146-6380\(01\)00164-4](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0146-6380(01)00164-4)

Zambrano B, G., Apráez G, J. E., & Navia E, J. F. (2014). Relationship between soil properties and bromatological variables grasses in a dairy system of Nariño. *Revista de Ciencias Agrícolas*, 31(2), 106–121.

Capítulo 9

Anexos

Tabla 6. Cargas relevantes e intensidades por CP. (1 débil, 2 moderada, 3 fuerte 4 muy fuerte)

Cargas		Cargas		Cargas		Cargas	
PC 1	Intensidad	PC 2	Intensidad	PC 3	Intensidad	PC4	Intensidad
666	1			666	2		
		675	1	672	2	677	3
687	1						
		698	1				
						718	1
732	1			732	1		
743	1						
750	1					749	1
				761	1		
793	1					792	2
				807	1		
		813	1			812	3
				891	1		
						901	1
						910	1
						919	3
				933	1		
		962	1	964	1		
		983	1				
				1000	2	1003	2
						1010	2
				1016	1	1020	3

				1044	1		
		1063	4	1061	1		
		1075	4				
1096	4	1096	4				
				1108	1	1107	3
				1124	1		
				1166	2		
1315	1					1311	1
		1332	1	1338	2	1330	1
1341	1						
						1351	1
1361	1			1361	2		
		1384	3	1384	1		
						1396	1
		1402	1				
				1419	2	1418	2
1421	1						
1438	1	1433	1			1435	2
1456	2	1451	1	1457	3	1457	3
		1462	1	1469	1		
		1469	1			1473	2
1488	1	1483	1	1489	2		
1497	1	1494	1				
1506	3	1503	1	1503	2	1503	1
						1507	4
		1512	1			1518	1
1520	2	1529	1	1520	3	1522	2
1540	2	1547	1	1540	4	1540	3
1559	4	1554	1	1559	4	1559	4
		1565	1				

1575	1	1573	1	1575	2	1573	2
		1580	1			1575	2
						1608	1
		1612	1			1612	1
1615	1			1615	1	1613	1
1622	1	1620	1			1615	2
1637	2	1632	1			1632	1
						1636	2
1653	4			1654	4	1653	4
1668	2	1666	1	1669	2		
1683	2	1680	1	1683	3	1684	3
1698	2	1693	1	1698	3	1698	3
		1704	1				
1717	2	1711	1				
		1729	1				
1732	1			1732	2	1736	3
				1738	1	1737	3
						1740	3

Dendrogramas de análisis de conglomerados y grupo asignado a partir de la CBM

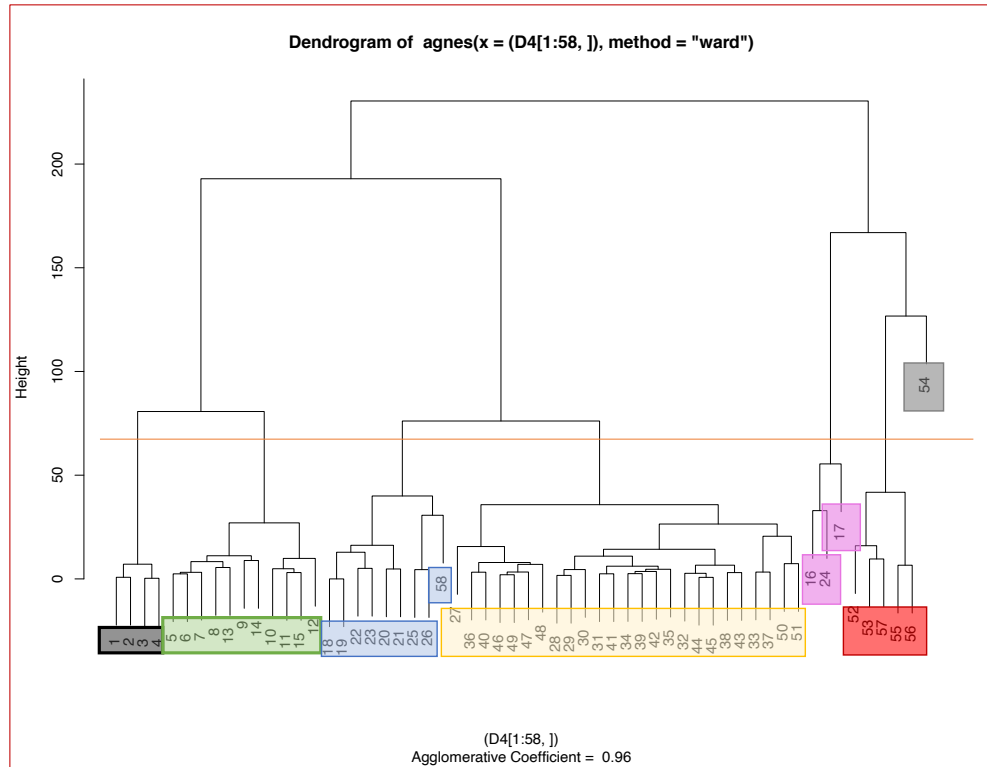


Figura 20. Cluster rutina Ward

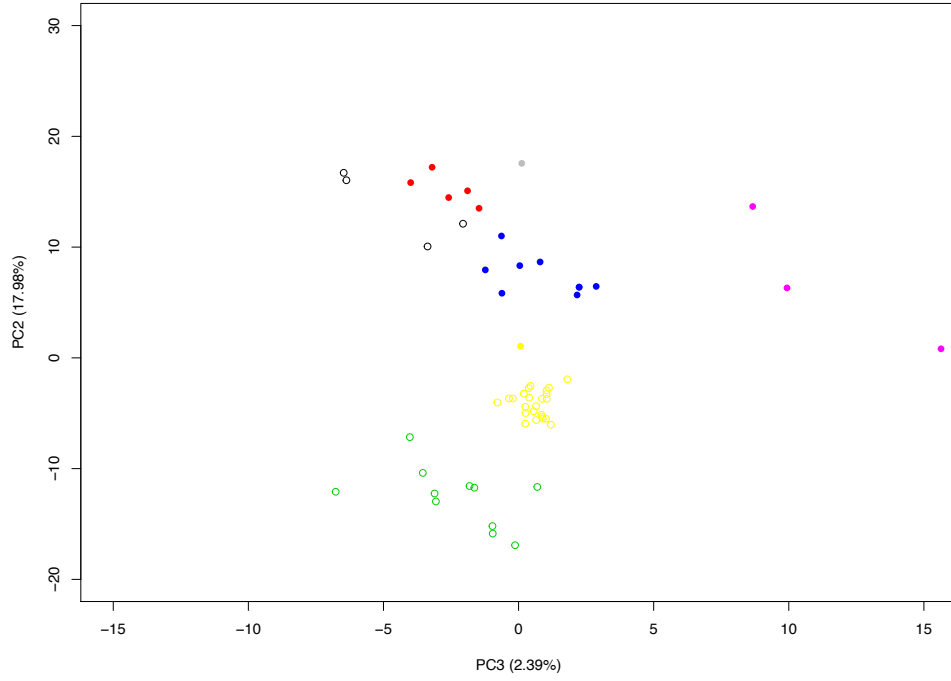


Figura 21. Grupos rutina Ward

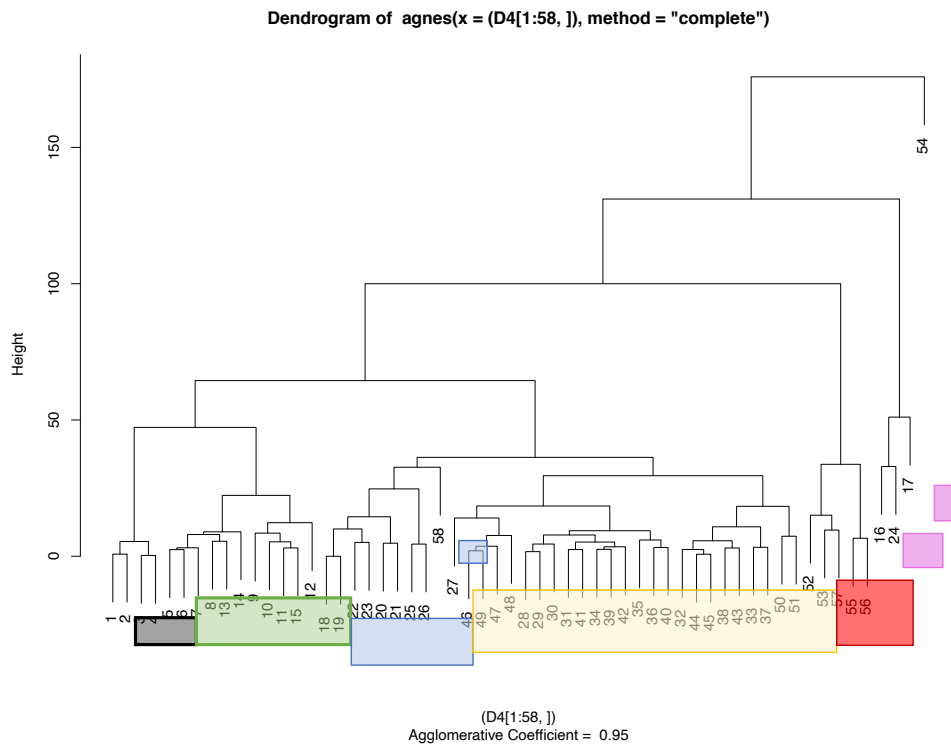


Figura 22. Cluster rutina Complete

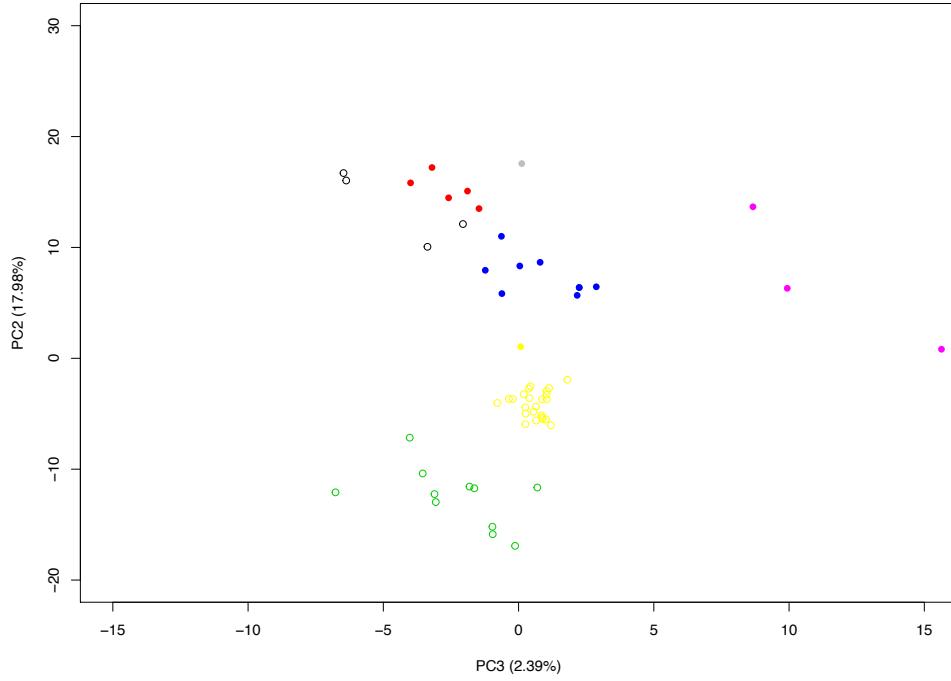


Figura 23. Grupos rutina Complete

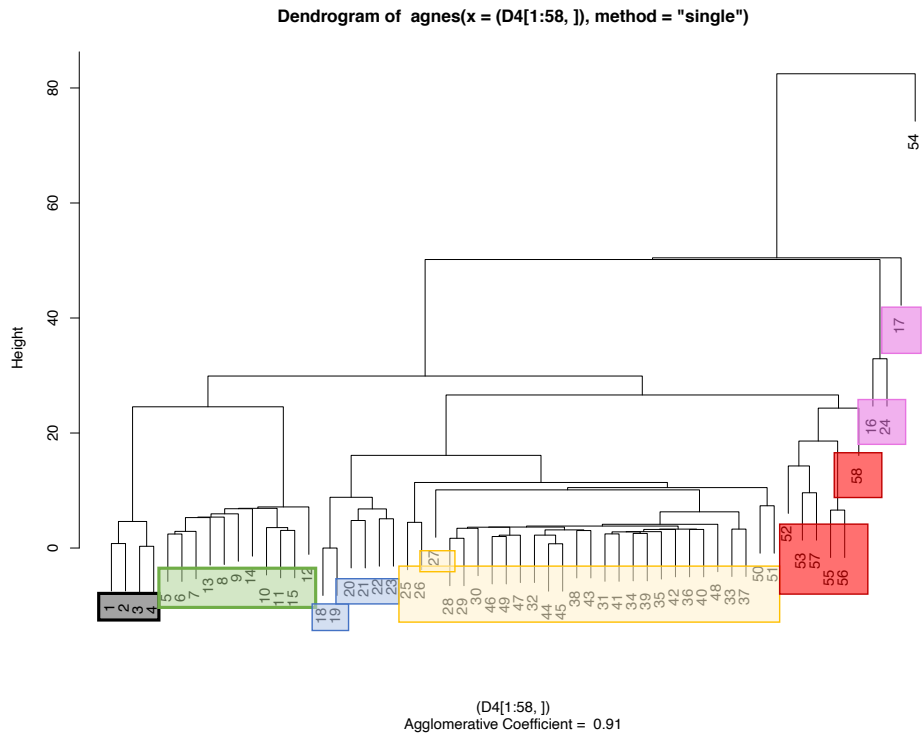


Figura 24. Cluster rutina Single

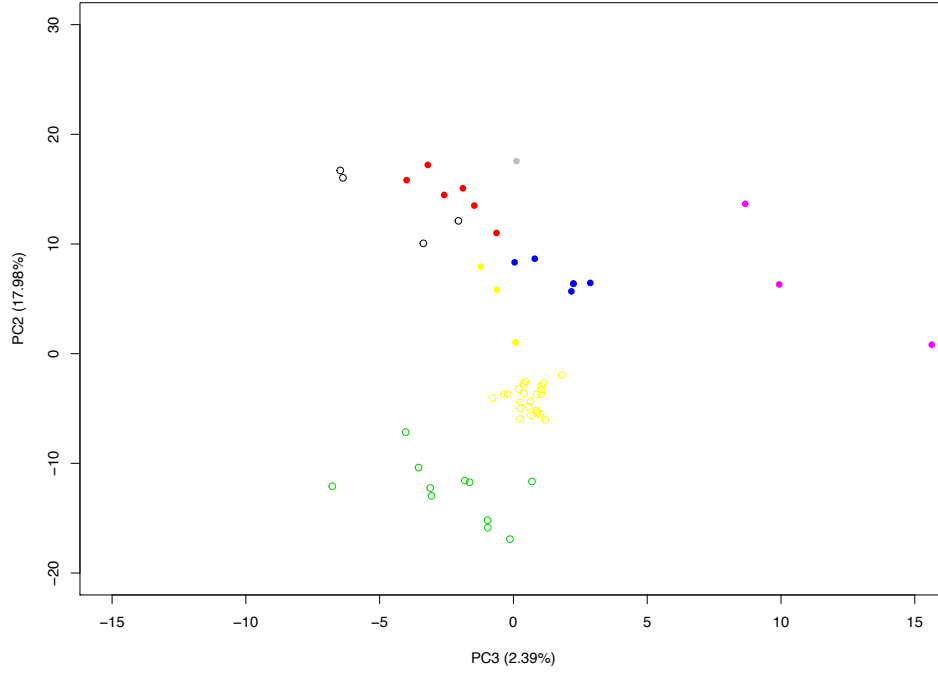


Figura 25. Grupos rutina Single

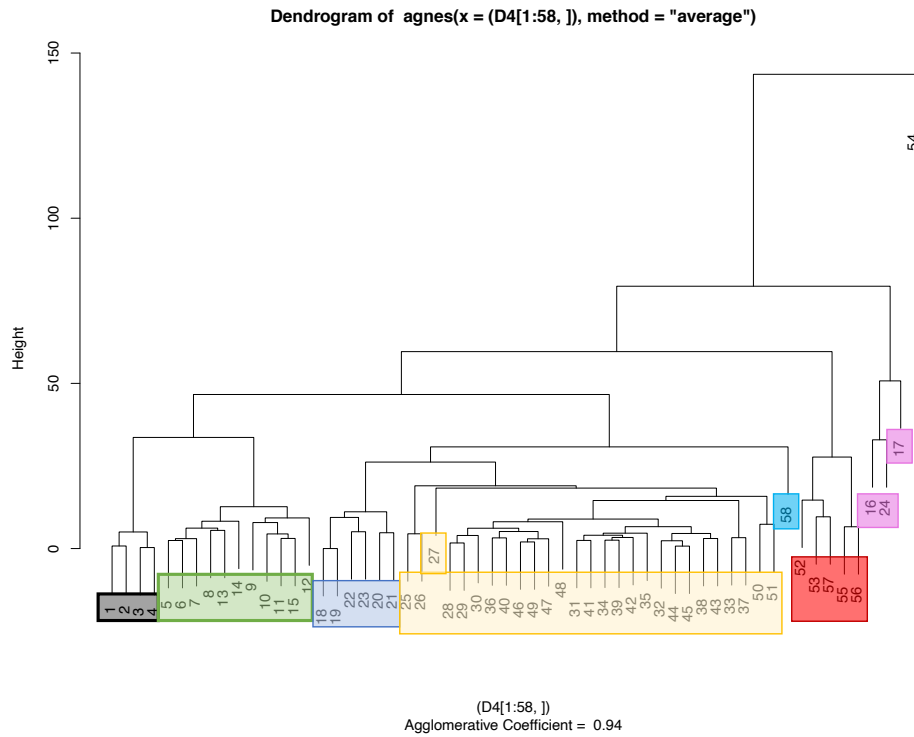


Figura 26. Cluster rutina Average

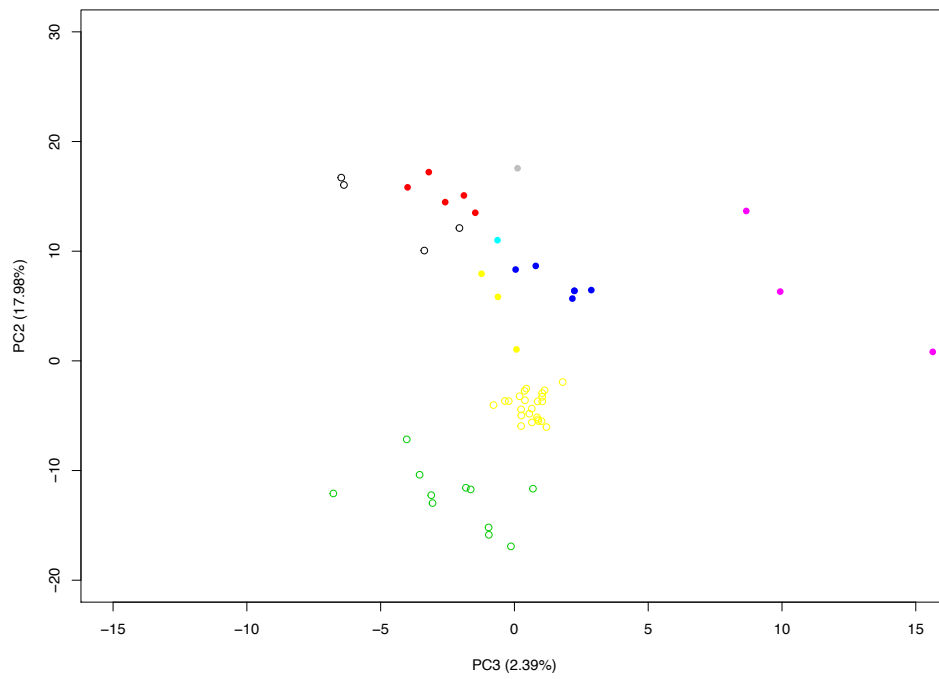


Tabla 7. Similitud entre rutinas divisivas y los grupos formados por la CBM

No.	Muestra	Ward	Average	Single	Complete	Diana	No.	Muestra	Ward	Average	Single	Complete	Diana
1	Aj S10-722S	1	1	1	1	1	30	Eunice 209-1s	4	4	4	4	3
2	Aj S10-723S	1	1	1	1	1	31	Eunice 209-2s	4	4	4	4	2
3	Aj S10-726S	1	1	1	1	2	32	Eunice 210-1s	4	4	4	4	2
4	Aj S10-727S	1	1	1	1	2	33	Eunice 210-2s	4	4	4	4	2
5	B014L34P1	2	2	2	2	3	34	Eunice 212-1s	4	4	4	4	2
6	B014L34P2	2	2	2	2	3	35	Eunice 212-2s	4	4	4	4	2
7	B014L34P3	2	2	2	2	4	36	Eunice 320-1s	4	4	4	4	3
8	B023L5P1	2	2	2	2	2	37	Eunice 320-2s	4	4	4	4	2
9	B023L5P2	2	2	2	2	5	38	Eunice 321-1s	4	4	4	4	2
10	B02L12P1	2	2	2	2	4	39	Eunice 321-2s	4	4	4	4	2
11	B02L12P2	2	2	2	2	4	40	Eunice 322-1s	4	4	4	4	2
12	B02L12P3	2	2	2	2	5	41	Eunice 322-2s	4	4	4	4	2
13	B09L24P1	2	2	2	2	4	42	Eunice 323-1s	4	4	4	4	2
14	B09L24P2	2	2	2	2	4	43	Eunice 323-2s	4	4	4	4	2
15	B09L24P3	2	2	2	2	4	44	Eunice 324-1s	4	4	4	4	2
16	Ch S04-230 2 S	5	6	6	6	4	45	Eunice 324-2s	4	4	4	4	2
17	Ch S04-230 huS	5	6	6	6	5	46	Eunice 339-1s	4	4	4	4	3
18	Ch S04-2301S	3	3	3	3	2	47	Eunice 339-2s	4	4	4	4	3
19	Ch S04-230S	3	3	3	3	2	48	Lorenzo 339z-1s	4	4	4	4	3
20	Ch S04-231 1 S	3	3	3	3	1	49	Lorenzo 339z-2s	4	4	4	4	3
21	Ch S04-231 2 S	3	3	3	3	1	50	Lorenzo 340z-1s	4	4	4	4	3
22	Ch S04-231 hu2S	3	3	3	3	1	51	Lorenzo 340z-2s	4	4	4	4	3
23	Ch S04-231hu1S	3	3	3	3	1	52	Mal S05-020S	6	5	5	5	3
24	Cua S05-010S	5	6	6	6	5	53	Mal S05-021S	6	5	5	5	2
25	Cue S04-218S	3	4	4	3	1	54	Pel S04-225S	7	7	7	7	5
26	Cue S04-219S	3	4	4	3	1	55	Pel S04-226S	6	5	5	5	3
27	Cue s05-002S	4	4	4	4	2	56	Pel S05-033S	6	5	5	5	3
28	Eunice 208-1s	4	4	4	4	3	57	Tla S05-004S	6	5	5	5	2
29	Eunice 208-2s	4	4	4	4	3	58	Tla S05-040S	3	8	5	3	1