

335228

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

“ESPECTROSCOPÍA INFRARROJA EN EL  
ESTUDIO DE PRODUCTOS LÁCTEOS”

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
F Í S I C O  
P R E S E N T A :  
E D U A R D O T R E J O V A R G A S

DIRECTOR DE TESIS:  
M. EN C. RAÚL WAYNE GÓMEZ GONZÁLEZ

2004



FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR





Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

ESTA TESIS NO SALE  
DE LA BIBLIOTECA



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

Autoriza la División General de Bibliotecas de la UNAM a digitalizar en formato electrónico e impreso el contenido de este trabajo recepcional.

NOMBRE: Eduardo Trejo Vargas

FECHA: 20/Sept/04

FIRMA: [Signature]

335228

**ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ**  
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:  
"Espectroscopía infrarroja en el estudio de productos lácteos"

realizado por Trejo Vargas Eduardo

con número de cuenta 93504775 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Físico.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis  
Propietario

M. en C. Raúl Wayne Gómez González

Propietario

Dra. María Ester Ortiz Salazar

Propietario

Dr. Francisco Morales Leal

Suplente

Dra. Rosalía Ridauro Sanz

Suplente

Dr. Raúl Escamilla Guerrero

Consejo Departamental de Físico

[Signature]  
M. EN C. ALICIA ZARZOSA PÉREZ  
Coordinadora de Licenciatura



FACULTAD DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICO

## Agradecimientos

Sólo queda reconocer a aquellas personas que me apoyaron durante la realización del presente trabajo, por todo su apoyo y compañerismo, pero sobre todo, por su amistad,

Raúl

Vivi

Rosalía

Mary

José Luis

Manolo

Carlos

y a quienes con su infinita paciencia siempre han estado conmigo en la buenas y en las malas, en especial a ti, Irma.

## Introducción

1. La leche	
1.1. Introducción-----	1
1.2. Proteínas-----	2
1.3. Proteínas de la leche-----	5
1.4. Nutrición humana-----	5
1.5. Importancia de la leche en la dieta humana-----	6
2. Espectroscopía infrarroja	
2.1. Introducción-----	7
2.2. Surgimiento de la espectroscopía infrarroja (EIR)-----	7
2.3. Bases teóricas de la EIR -----	8
2.4. Absorción infrarroja-----	10
2.5. Modos normales de vibración-----	12
2.6. Simetría y teoría de grupos-----	13
2.7. Grupos puntuales-----	16
3. Dispositivos experimentales	
3.1. Introducción-----	17
3.2. Elementos de un espectrómetro IR por transformada de Fourier-----	17
3.3. Ley de Beer-Lambert-----	19
3.4. Arreglo experimental-----	20
4. Material	
4.1. Leches en polvo -----	22
4.2. Preparación de muestras -----	22
5. Resultados y conclusiones	
5.1. Análisis-----	24
5.2. Conclusiones-----	28
6. Bibliografía-----	31

## Introducción

La espectroscopía infrarroja (EIR) resulta una herramienta útil para la posible identificación de proteínas en algunas sustancias orgánicas, en particular para la leche en polvo. En el presente trabajo se analiza el contenido proteico de algunas leches comerciales mediante esta técnica, con el fin de tratar de identificar principalmente caseínas, caseinatos, suero de leche y proteína de soya. En base a este análisis se podría establecer un control de calidad que permita al consumidor conocer realmente las sustancias que está ingiriendo.

En el primer capítulo se toca el tema de la leche. Se expone su composición e importancia en la alimentación del ser humano y de las proteínas que la constituyen, en particular se menciona a las caseínas.

Es necesario contar con una herramienta para estudiar las vibraciones moleculares en la banda infrarroja. El capítulo dos abarca los fundamentos de la EIR necesarios para el estudio de las muestras. Se aborda el problema del comportamiento de moléculas en un potencial anarmónico y se discute la manera en que se da la absorción IR en las mismas.

En el capítulo tres se describe el funcionamiento del espectrómetro IR por transformada de Fourier (FT-IR) utilizado durante el desarrollo de esta tesis.

El procedimiento para la elaboración de pastillas así como la información que los fabricantes de leche brindan al consumidor, se detalla en el capítulo cuatro.

Por último, en el capítulo cinco se presentan los resultados obtenidos en este estudio, así como las conclusiones que de ellos pudimos obtener.

# Capítulo 1

## La leche

### 1.1 Introducción

Una característica de los mamíferos es que las hembras son capaces de alimentar a sus crías segregando un líquido blanquecino al que llamamos *leche*. Las secreciones de leche se originan en las glándulas mamarias después del parto. Su importancia radica en el alto valor nutritivo para alimentar a la cría, ya que le suministra los componentes que en ella se encuentran en proporciones adecuadas. Así, cada una de las leches representa el alimento más balanceado y necesario, para cada especie, en los primeros días de vida.

En el desarrollo de este trabajo se hablará de la leche de vaca, importante en la dieta del ser humano por su contenido nutritivo.

El *calostro* es un líquido que produce la madre en los primeros días del recién nacido. Su concentración de sólidos y su composición<sup>1</sup> fortalece el sistema inmunológico de defensa. Pasada esta etapa, la hembra sigue produciendo leche durante la lactancia, en la cual las proteínas generalmente sobrepasan el 3% del total de los sólidos contenidos en ella.

La leche está compuesta esencialmente por agua, grasas, proteínas, azúcares, vitaminas y minerales. Derivadas de ella, el hombre ha sido capaz de elaborar diferentes productos como el queso, la leche en polvo, leche condensada, leche evaporada, el yogur, los helados y las mantequillas. En la tabla 1.1 se muestra la composición de la leche de algunas razas de vacas. Cabe mencionar que los datos son en promedio ya que se pueden encontrar diferencias entre dos vacas de la misma raza.

La leche, al igual que sus derivados, presenta ciertas propiedades físicas propias que son consecuencia de la interacción de sus componentes. El color blanco se debe principalmente a la dispersión completa del espectro visible provocada esencialmente por las partículas de grasa y las caseínas<sup>2</sup>. A pesar de tener entre un 12% y 14% de sólidos, la leche se comporta como un fluido newtoniano semejante al agua, con una viscosidad de 2 centipoises<sup>3</sup> y posee un calor específico de 0.93 kcal/kg°C.

---

<sup>1</sup> El calostro está formado en promedio de 79% de agua, 10% de proteínas, 7% de grasas, 3% de lactosa y 1% de minerales.

<sup>2</sup> Las caseínas son proteínas de la leche.

<sup>3</sup>  $Poise = \frac{dina \cdot seg}{cm^2}$



Raza	Agua	Grasa	Proteínas	Lactosa	Minerales
Holstein	88.12	3.44	3.11	4.61	0.72
Airshire	87.39	3.93	3.47	4.48	0.73
Suiza café	87.31	3.97	3.37	4.63	0.72
Guernsey	86.36	4.50	3.60	4.79	0.75
Jersey	85.66	5.15	3.70	4.75	0.74

Tabla 1.1. Composición de la leche de algunas razas de vaca. Los datos están en porcentajes.

## 1.2 Proteínas

Probablemente al escuchar la palabra “proteína”<sup>4</sup>, cada uno de nosotros imaginaría aquellos alimentos que contienen un gran número de ellas, por ejemplo un buen corte de carne o un vaso de leche fresca. Sin embargo, pocas veces se nos ocurrirá que las proteínas son aquellas sustancias orgánicas de estructura molecular compleja que desempeñan distintas acciones biológicas en el organismo vivo, que van desde la reparación y formación de tejidos hasta las funciones enzimáticas, hormonales y de anticuerpos.

A pesar de su complejidad e inmensa diversidad, todas las proteínas conocidas se componen de 20 unidades estructurales llamadas *aminoácidos* (aa). Los aminoácidos son moléculas formadas por un grupo carboxilo (-COOH) y un grupo amino (-NH<sub>2</sub>) ligados a un átomo de carbono (C<sub>α</sub>). Las otras dos valencias del carbono se completan con un átomo de hidrógeno y un grupo variable llamado radical (R), el cual da la naturaleza de cada una de las veinte estructuras (Figura 1.1).

Los aa se unen mediante enlaces covalentes conocidos con el nombre de *enlace amida* o *peptídico*. Al momento de unirse dos de ellos se desprende una molécula de agua. Este fenómeno se muestra en la figura 1.2.

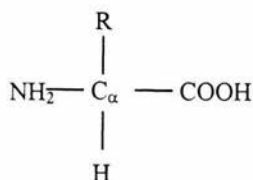


Figura 1.1. Estructura de un aminoácido.

<sup>4</sup> Del griego *protos*, *proteus*, que significa lo primero o más importante. Término sugerido por Berzelius y empleado por primera vez por el químico holandés Mulder en 1838.

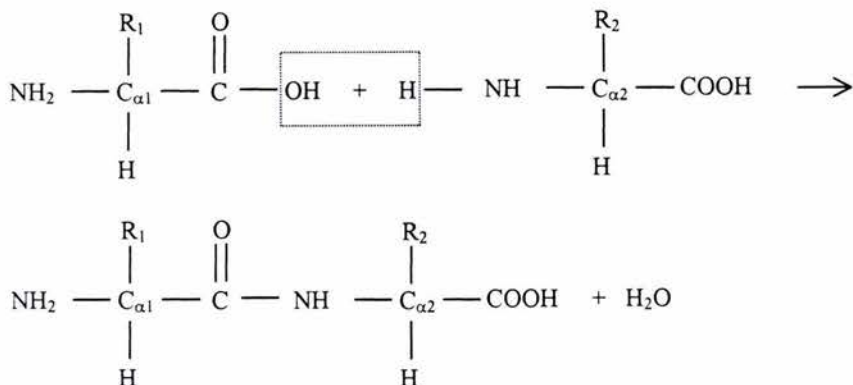


Figura 1.2. Enlace peptídico

De esta manera, los péptidos resultan de la unión de dos o más aa. Cuando el número excede las 50 unidades, el polipéptido<sup>5</sup> se denomina proteína. La gran cantidad de proteínas que se conocen están formadas únicamente por los veinte aa distintos, los cuales aparecen enlistados en la tabla 1.2.

Aminoácido	Abreviatura
Valina	val
Leucina	leu
Isoleucina	ile
Metionina	met
Fenilalanina	phe
Aspargina	asn
Ácido Glutámico	glu
Glutamina	gln
Histidina	his
Lisina	lys

Aminoácido	Abreviatura
Arginina	arg
Ácido Aspártico	asp
Glicina	gly
Alanina	ala
Serina	ser
Treonina	thr
Tirosina	tyr
Triptófano	trp
Cisterina	cys
Prolina	pro

Tabla 1.2. Los 20 aminoácidos que componen las proteínas.

El estudio de una proteína se divide en cuatro niveles llamados estructura *primaria*, *secundaria*, *terciaria* y *cuaternaria*. Cada una de ellas provee información acerca de la disposición de los aa. La estructura primaria indica la secuencia de aa de la proteína formada en una sola cadena. Dos estructuras moleculares, la *hélice alfa* y las *láminas beta*, conforman la estructura secundaria dando lugar al ordenamiento regular y periódico de la

<sup>5</sup> Suele dársele el nombre de *oligopéptido* si el número de aa no es mayor a 10, *polipéptido* si es superior. Cuando el número excede 50 aa o si su peso molecular es mayor de 5,000 uma se habla ya de proteínas.

proteína en el espacio. Cuando la cadena polipeptídica se curva o se dobla tridimensionalmente para crear una estructura estrechamente plegada y compacta, se hace referencia a la estructura terciaria y, finalmente, a diferencia de las anteriores, la estructura cuaternaria no necesariamente existe en todos los polipéptidos. Esta se refiere a la asociación de dos o más cadenas iguales o diferentes, a través de uniones no covalentes. En la figura 1.3 las cuatro estructuras antes mencionadas se ejemplifican en la hemoglobina.

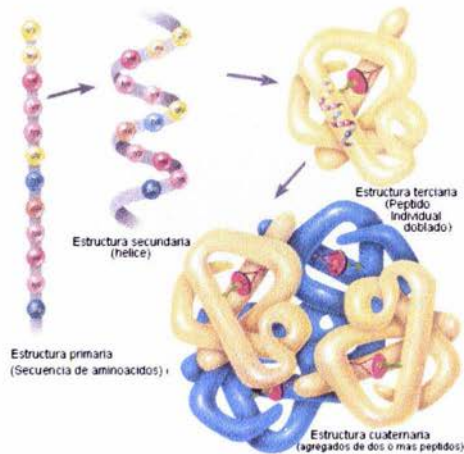


Figura 1.3. Las cuatro estructuras de la hemoglobina<sup>6</sup>.

Cada proteína está diseñada para cumplir una función específica. La alteración de su estructura puede significar la pérdida de la habilidad para desarrollar su función. A este fenómeno se le llama *desnaturalización*, y consiste básicamente en la pérdida de la estructura terciaria. En un sentido termodinámico se refiere al cambio de un estado ordenado de las moléculas a otro desordenado incrementando la entropía del sistema.

### 1.3 Proteínas de la leche

La leche merece especial atención debido a la gran cantidad de proteínas que contiene, las cuales se han dividido en dos grandes grupos: las *caseínas*, que representan el 80% del total, y las *seroproteínas*, o proteínas del suero que forman el 20% restante (tabla 1.3).

<sup>6</sup> Imagen obtenida de *Hipertextos del Área de la Biología*, J.S. Raisman y Ana M. González. [www.biología.edu.ar/macromoleculas/structup.htm](http://www.biología.edu.ar/macromoleculas/structup.htm)

Proteína		Concentración (%)
Caseínas 80%	$\alpha_{s1}$	42
	$\beta$	25
	$\kappa$	9
	$\gamma$	4
Proteínas del suero (seroproteínas) 20%	Lactalbúmina	14
	Lactoglobina	5
	Inmunoglobulina	1

Tabla 1.3. Proteínas de mayor concentración en la leche.

A pesar de que se diferencian por su movilidad electroforética<sup>7</sup>, presentan algunas propiedades en común:

- i. presentan un alto contenido de ácidos glutámico y aspártico<sup>8</sup> cuando sus carboxilos se encuentran ionizados a un pH de 6.7 provocando una carga negativa que los estabiliza,
- ii. el aa prolina, también abundante, está distribuido homogéneamente en toda la estructura primaria impidiendo la formación de hélices como estructura secundaria<sup>9</sup>,
- iii. contienen más aa hidrófobos que hidrófilos lo que resulta en zonas apolares en su estructura primaria.

#### 1.4 Nutrición humana

Una buena alimentación permite un mejor crecimiento físico y mental del ser humano. Es recomendable que en una dieta normal se encuentren los *nutrientes esenciales*<sup>10</sup>. Los nutrientes esenciales están conformados por los grupos de las proteínas, las vitaminas, los minerales, los hidratos de carbono y las grasas. Un balance adecuado en el consumo de alimentos ricos en cada uno de estos grupos, provee de un buen desempeño en el desarrollo de las actividades cotidianas.

<sup>7</sup> La electroforesis es una técnica para separar proteínas. Éstas se colocan en un gel y al aplicar un campo eléctrico de alto voltaje, se mueven con diferente rapidez dependiendo de su carga y tamaño.

<sup>8</sup> El ácido glutámico es un aa con un segundo grupo carboxilo en su cadena lateral y el ácido aspártico presenta un grupo carboxilo en un extremo de su cadena lateral (ver figura 1.1).

<sup>9</sup> Excepto la caseína  $\kappa$ ; que presenta una pequeña porción de hélice.

<sup>10</sup> Son aquellos que el organismo humano no puede sintetizar y que deben ser incorporados a la dieta del individuo. Estos nutrientes esenciales, son los aa triptófano, fenilalanina, valina, leucina, isoleucina, treonina, arginina, histidina, metionina y lisina.

Autoridades nacionales e internacionales recomiendan que se ingieran cierta cantidad de nutrientes. En la tabla 1.4, comúnmente conocida como *pirámide nutrimental*, se indican aquellas cantidades máximas de nutrientes para llevar a cabo una dieta sana y equilibrada.

1 ración o menos	Grasas y aceites	Margarina, mantequilla
2 a 3 raciones	Lácteos	Leche, yogur, crema
2 a 3 raciones	Proteínas	Carnes, leguminosas, huevo
3 a 5 raciones	Vitaminas y minerales	Frutas y verduras
6 a 11 raciones	Hidratos de carbono	Pan, arroz, pasta.
Beber en abundancia	Agua	Agua hervida o purificada

*Tabla 1.4. Pirámide nutrimental recomendada por autoridades alimentarias. \*Una ración es una medida arbitraria cuyo valor varía según el alimento que se ingiera. La tabla se refiere a los valores de la ingesta diaria recomendada.*

### 1.5 Importancia de la leche en la dieta humana

Se ha mencionado anteriormente que la leche presenta los componentes necesarios para el crecimiento de los mamíferos, en particular el del ser humano. Su riqueza en energía, proteínas de fácil asimilación, grasa, calcio, fósforo y varias vitaminas, hacen de la leche el alimento básico de la cría en sus primeros años de vida. Desafortunadamente el costo de la leche es elevado, factor que contribuye a una mala alimentación en aquellos países en vías de desarrollo. En México, el gobierno de la República distribuye alrededor de 3 millones 300 mil litros de leche en más de 840 municipios<sup>11</sup> del país diariamente, a través de la empresa paraestatal *Liconsa S.A. de C.V.* Ésta se vende a aquellas personas de escasos recursos económicos al precio de 3.50 pesos por litro, menos de la tercera parte del precio promedio de la leche de marca comercial. Sin embargo, la insuficiente producción del líquido en el país, ha obligado a que el gobierno importe leche principalmente de Canadá, Estados Unidos, Polonia, El Reino Unido y Nueva Zelanda.

<sup>11</sup> Tercer informe de gobierno del Presidente Vicente Fox 2003.

## Capítulo 2

### Espectroscopía infrarroja

#### 2.1 Introducción

Un espectro puede definirse como una representación gráfica de la distribución de la intensidad de la radiación electromagnética, emitida o absorbida por un sistema, en función de la longitud de onda o la frecuencia de la misma. Se distinguen en una muestra dos tipos de espectros: los de emisión y los de absorción.

Los espectros de emisión se obtienen excitando adecuadamente una muestra para que emita radiación electromagnética, cuya intensidad se precisa mediante un espectrómetro. Para obtener un espectro de absorción primero se ilumina la muestra con radiación continua, (como la emitida, por ejemplo, por un filamento incandescente) y posteriormente se analiza la proporción de radiación absorbida por la muestra, en función de su frecuencia o longitud de onda.

#### 2.2 Surgimiento de la espectroscopía infrarroja (EIR)

Fue Isaac Newton quien mostró que la luz solar se compone de diferentes colores, al hacer pasar un rayo de luz a través de un prisma. Más tarde, Sir William Herschel fue el primero en reconocer la existencia de la luz o radiación infrarroja. Sabiendo que este tipo de radiación es invisible al ojo humano, colocó termómetros de mercurio con el bulbo pintado de negro para absorber la radiación. Finalmente, en 1800, Herschel colocó una muestra de agua de pozo entre el termómetro y la fuente de energía. La diferencia entre las temperaturas, sin la muestra y con ella, es una medida de la absorción de radiación infrarroja. Al variar la radiación que atraviesa la muestra, Herschel mostró que la absorción varía con la longitud de onda de la luz infrarroja (ver tabla 2.1). De esta manera se puede decir que la espectroscopía infrarroja es una medida de la absorción de luz infrarroja por la muestra.

Durante los siguientes años se hicieron varias investigaciones en la región del infrarrojo. Abney y Festing fueron los primeros en observar un espectro de vibración molecular en 1881. Prepararon una emulsión fotográfica la cual era sensible cerca de la región infrarroja, arriba de los 1200 nanómetros, y obtuvieron el espectro de absorción de 48 sustancias orgánicas.

>14,000 cm <sup>-1</sup>	14,000 a 4,000cm <sup>-1</sup>	4,000 a 400 cm <sup>-1</sup>	400 a 4 cm <sup>-1</sup>	<4 cm <sup>-1</sup>
Luz visible UV y rayos X	Infrarrojo cercano	Infrarrojo medio	Infrarrojo lejano	Microondas Ondas de radio

Tabla 2.1. El espectro electromagnético muestra los intervalos de número de onda (cm<sup>-1</sup>) para diferentes tipos de radiación electromagnética.

Entre 1889 y 1890, Angstrom registró la absorción de la radiación IR del monóxido de carbono, dióxido de carbono, metano, benceno y otros compuestos en un intervalo superior a los 8 μm utilizando un espectrómetro de prisma de sal de roca. Por la misma época Julius obtiene espectros infrarrojos arriba de 10 μm de 20 componentes orgánicos llegando a la conclusión de que la absorción de “las ondas de calor” está relacionada con movimientos intramoleculares o, en otras palabras, con la estructura interna; es decir, el agrupamiento de los átomos en una molécula determina el carácter de la absorción de la radiación IR.

Ya en 1905, Coblenz publicó un atlas con los espectros de 120 compuestos orgánicos mientras realizaba su proyecto posdoctoral empleando instrumentos diseñados por él mismo.

La importancia de la espectroscopía infrarroja para fines industriales, se empezó a reconocer en la década de 1930 gracias al desarrollo de técnicas de servomecanismos desarrollados durante la Segunda Guerra Mundial. Así se comercializaron los primeros espectrómetros infrarrojos automáticos en los Estados Unidos. No fue sino hasta la década de los años sesenta cuando la técnica infrarroja se convirtió en una herramienta analítica rutinaria de laboratorio. Con el avance tecnológico los espectrómetros han evolucionado hasta llegar a ser instrumentos sofisticados para la identificación de materiales gracias al desarrollo computacional.

### 2.3 Bases teóricas de la EIR

La radiación electromagnética (EM) está compuesta por ondas eléctricas y magnéticas que oscilan en planos perpendiculares entre sí. La parte eléctrica de la onda, representada por un vector eléctrico  $\vec{E}$ , interactúa con las moléculas provocando una absorbancia infrarroja.

Las ondas de luz pueden caracterizarse por su longitud de onda  $\lambda$  o por su frecuencia  $\nu$  y están relacionadas por la ecuación  $c = \lambda\nu$ , donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. Así mismo, la energía (E) de un fotón varía proporcionalmente con su frecuencia según

$$E = h\nu \quad (\text{Ec. 2.1})$$

siendo  $h$  la constante de Planck.

Sin embargo, en espectroscopía es muy común trabajar con el recíproco de la longitud de onda como unidad de medición. Esta cantidad se conoce como *número de onda*  $\bar{\nu}$ . Los números de onda correspondientes a diferentes tipos de radiación EM se muestran en la tabla 2.1.

En primera aproximación, podemos suponer a una molécula diatómica como un sistema de masas unidas por un resorte de constante  $k$  (enlace químico) que se comporta como un oscilador armónico, siguiendo la ley de Hooke  $F = -kx$  en una sola dimensión (figura 2.1). Cuando el sistema empieza a vibrar, la frecuencia de oscilación dependerá del tamaño de las masas y de la rigidez del resorte. Para una constante de resorte grande, es decir, un resorte rígido, se obtiene una frecuencia de oscilación alta, mientras que para un resorte de constante menor se obtiene una frecuencia de oscilación baja.

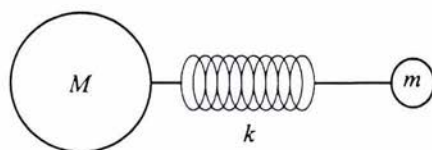


Figura 2.1. Dos masas acopladas a un resorte de constante  $k$ .

De esta manera, si se considera una molécula como aquella combinación de átomos con diferentes masas y diferentes enlaces químicos, se encuentra que cada una posee su propia frecuencia armónica que la caracteriza. Estos sistemas se describen utilizando la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi(\bar{r}, t) = \hat{E}\Psi(\bar{r}, t) \quad (\text{Ec. 2.2})$$

donde  $\Psi$  es la función de onda dependiente de la posición ( $\bar{r}$ ) y del tiempo ( $t$ ), y  $H$  el hamiltoniano del sistema dado por

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{r}) \quad (\text{Ec. 2.3})$$



con  $V(\bar{r})$  el potencial al que está sujeto la molécula.

Para el potencial armónico  $V = \frac{1}{2}m\omega x^2$ , donde  $\omega$  es la frecuencia de vibración, la solución de las energías viene dada por

$$E_n = h\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{Ec. (2.4)}$$

donde  $n$  es el número cuántico asociado con las vibraciones moleculares. Asimismo, si las moléculas vibran al interactuar con radiación EM y la energía suministrada al sistema es exactamente igual a la diferencia entre dos de sus niveles de energía, entonces los pequeños osciladores podrán absorberla y vibrarán a la misma frecuencia aumentando su amplitud. Para átomos sujetos a las condiciones anteriores, la frecuencia de  $\omega$  vibración viene dada por

$$\omega = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (\text{Ec. 2.5})$$

donde  $\mu$  representa la masa reducida de la molécula y  $k$  la constante de un resorte.

#### 2.4 Absorción infrarroja

Cuando la radiación IR interactúa con la materia, ésta puede absorberla sólo si la energía es exactamente igual a la diferencia entre dos estados estacionarios o niveles de energía. Para llevar a la molécula del estado 1 al estado 2 cuando se radia con una energía con frecuencia  $\nu$  (figura 2.2), es necesario que

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu \quad (\text{Ec. 2.6})$$

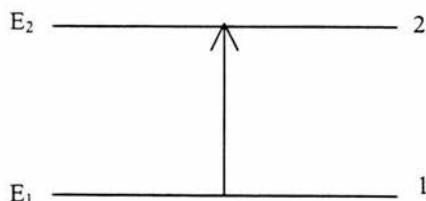


Figura 2.2. Absorción de energía entre los estados 1 y 2. La molécula pasa a un estado excitado 2.

Para una molécula se distinguen tres tipos de energía de absorción, la *vibracional* ( $E_n$ ) la *rotacional* ( $E_l$ ) y la *electrónica* ( $E_e$ ). La radiación que interactúa con la molécula produce vibraciones en los núcleos con respecto a la posición de equilibrio y rotaciones con respecto a su centro de masas. Las transiciones electrónicas<sup>12</sup> no contribuyen de manera significativa. Entonces la energía total que absorbe una molécula se puede escribir como

$$E = E_n + E_l + E_e \quad (\text{Ec. 2.7})$$

donde la energía vibracional esta dada por la ecuación 2.4 y la energía rotacional

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{Ec. 2.8})$$

siendo  $I = \mu R_0^2$ , la inercia rotacional respecto al eje de rotación y  $R_0$  la separación de equilibrio entre los núcleos.

Se ha mencionado que la vibración describe el movimiento de una molécula aproximándose al movimiento de dos masas unidas por un resorte obedeciendo la ley de Hooke. El potencial para un oscilador armónico está dado por

$$V = \frac{1}{2} kx^2 \quad (\text{Ec. 2.9})$$

y la energía asociada al sistema es

$$E = \frac{1}{2} kA^2 \quad (\text{Ec. 2.10})$$

donde  $A$  es la amplitud de la oscilación.

En la práctica, el potencial producido por un enlace químico no es verdaderamente el de un oscilador armónico como se muestra en la figura 2.3a, (aunque siempre se puede aproximar a éste para oscilaciones pequeñas). Este potencial se conoce como potencial *anarmónico* (ver figura 2.3b). Si la energía aumenta considerablemente, los niveles de energía no estarán igualmente espaciados en relación a un potencial armónico y llegará el momento en el cual los enlaces de la molécula se romperán. El valor de la energía para que ocurra dicho "rompimiento" se llama *energía de disociación*.

Las transiciones dipolares eléctricas permitidas entre los estados vibracionales del oscilador armónico, cuya energía está dada por la ecuación 2.6, están sujetas a la siguiente regla de selección:

$$\Delta n = \pm 1 \quad (\text{Ec. 2.11})$$

<sup>12</sup> Las transiciones electrónicas se refieren a los estados excitados que los electrones pueden alcanzar al absorber energía. Los espectros electrónicos se observan en la región visible y ultravioleta.

Las bandas que cumplen con  $\Delta n = \pm 1$  se llaman *bandas fundamentales*. Con mucha menor probabilidad, y debido a la anarmonicidad del potencial, puede ocurrir que  $\Delta n = \pm 2, \pm 3 \dots$  dando lugar a la aparición de otras bandas llamadas *sobretonos (overtones)*.

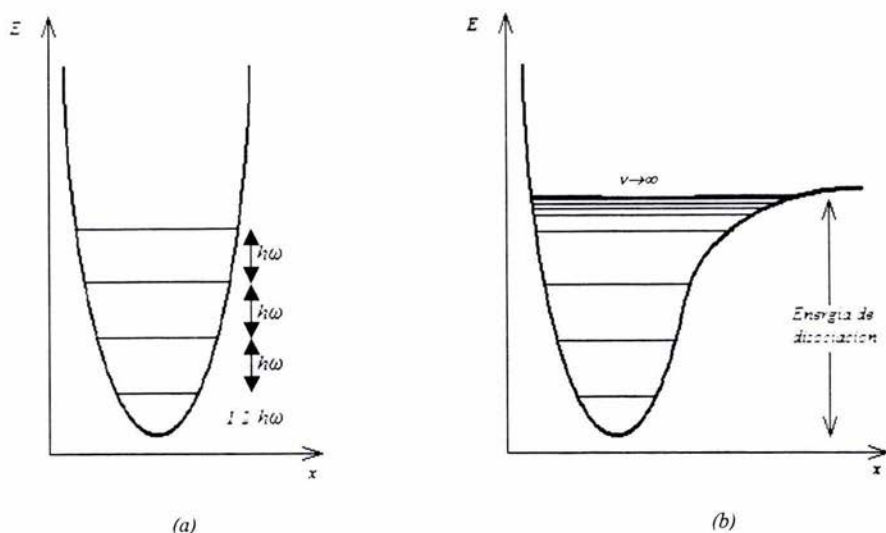


Figura 2.3. Oscilador armónico (a) y anarmónico (b).

## 2.5 Modos normales de vibración

Para describir las posiciones  $(x,y,z)$  de  $N$  átomos que constituyen a una molécula se requieren  $3N$  grados de libertad (coordenadas). Tres de éstas coordenadas están asociadas con el movimiento del centro de masas y otras tres (o dos) para describir la rotación de la molécula no lineal (o lineal) en torno al centro de masas, suponiéndola como un cuerpo rígido. Quedan entonces  $3N-6$  (o  $3N-5$  para moléculas lineales) coordenadas o formas de vibración para describir a una molécula. Los movimientos vibracionales de una molécula pueden ser demasiado complicados para su estudio, sin embargo, se pueden descomponer en oscilaciones periódicas elementales llamadas *modos normales de vibración*. Así, cualquier oscilación que realice la molécula se puede describir por una superposición de los modos normales. En la figura 2.4 se muestran cuatro modos de vibración para la molécula

del  $\text{CO}_2$ . En los incisos *a)* y *b)* los modos son de tensión simétrica y asimétrica respectivamente mientras que en los incisos *c)* y *d)* los dos modos son de flexión<sup>13</sup>.

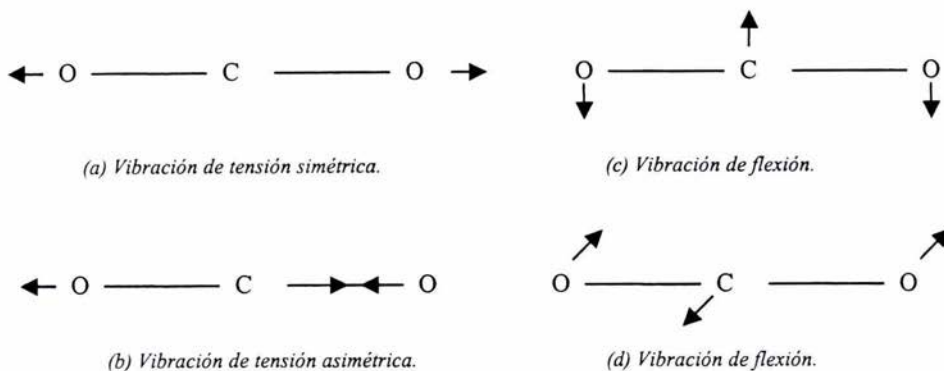


Figura 2.4. Modos normales de vibración de la molécula  $\text{CO}_2$ .

## 2.6 Simetrías y teoría de grupos

La ecuación de Schrödinger permite resolver sistemas cuánticos relativamente sencillos. Cuando el sistema bajo estudio es muy complejo resulta de gran ayuda para su análisis tomar en cuenta sus posibles simetrías. La *teoría de grupos* permite aprovechar las propiedades de simetría para obtener información sobre el sistema. Llamaremos *operación de simetría* a aquella que deja a la molécula en una posición indistinguible de la original y *elemento de simetría* a aquél con el cual se realiza una operación de simetría. Se mencionan a continuación cinco elementos de simetría.

El elemento de simetría *identidad* es aquél que deja a la molécula intacta, es decir, no le hace nada. Aunque la identidad podría parecer un elemento simple, es necesario para satisfacer matemáticamente la teoría de grupos. Todas las moléculas poseen este elemento cuyo símbolo es *I* o *E*.

Se dice que una molécula tiene un *eje de rotación*  $C_n$ , cuando al aplicar una rotación de  $2\pi/n$  radianes con respecto a un eje, la posición final es indistinguible de la inicial. En la figura 2.5 se muestran rotaciones  $C_3$  aplicadas a la molécula plana de trifluoruro de boro. El giro es de  $2\pi/3 = 120^\circ$  alrededor de un eje perpendicular a la página, con centro en el átomo de boro.

<sup>13</sup> Es común llamar a la tensión "*stretch*" y a la flexión "*bend*".

*Reflexión con respecto a un plano*  $\sigma$ , es cuando la molécula posee un plano de simetría tal que la reflexión con respecto a éste, deje intacta a la molécula. Se puede pensar a la reflexión con respecto a un plano como la reflexión que sufre una imagen con respecto a un espejo plano. Por ejemplo, la molécula piramidal  $F_2SO$  mostrada en la figura 2.6, tiene un plano vertical  $\sigma$ . El plano pasa a través del oxígeno y el azufre y bisecta al ángulo  $F_1SF_2$  dando como resultado el intercambio de los átomos de flúor. Es claro que al aplicar dos veces la reflexión  $\sigma$ , la configuración resultante será idéntica a la original:  $\sigma \cdot \sigma = \sigma^2 = I = E$ .

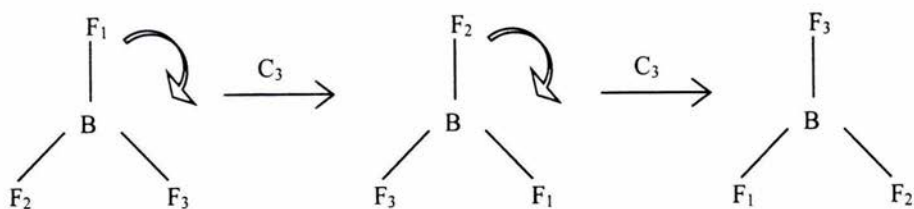


Figura 2.5. Dos rotaciones  $C_3$  del trifloruro de boro.

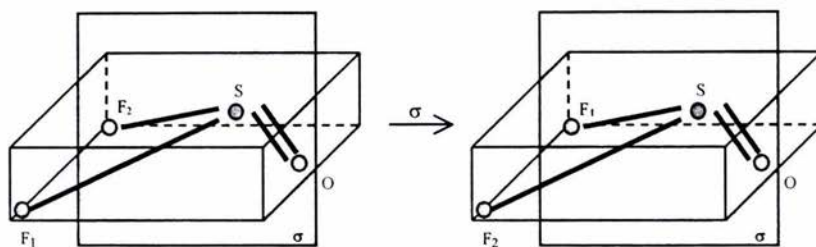


Figura 2.6. Reflexión con respecto al plano  $\sigma$  de la molécula  $F_2SO$ .

Una *reflexión impropia*  $S_n$  consiste en una rotación de  $2\pi/n$  seguida de una reflexión con respecto a un eje perpendicular al plano de simetría que deja a la molécula en una posición indistinguible de la original. La molécula del aleno puede representarse en un prisma como muestra la figura 2.7. Primero se gira la molécula con respecto al eje de rotación  $C_4$  y después se refleja con respecto al plano  $\sigma_v$  (figura 2.8).

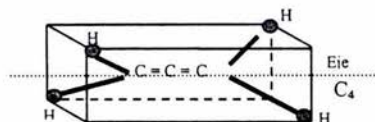


Figura 2.7. Modelo de la molécula de aleno.

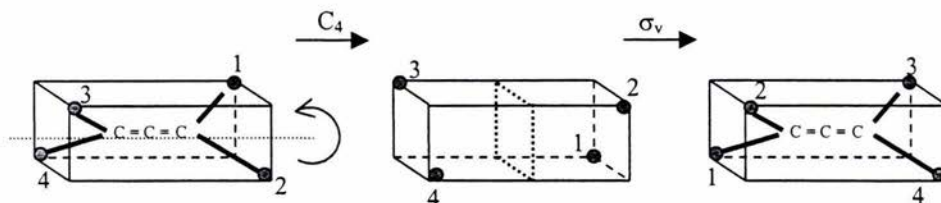


Figura 2.8. Rotación y reflexión de la molécula de aleno.

El *centro de inversión*  $i$ , consiste en pasar cada átomo a través del centro de la molécula y colocarlo en el lado opuesto de la misma. Este elemento de simetría queda representado sobre la molécula hexacarbonilo de molibdeno ( $\text{Mo}(\text{CO})_6$ ) en la figura 2.10.

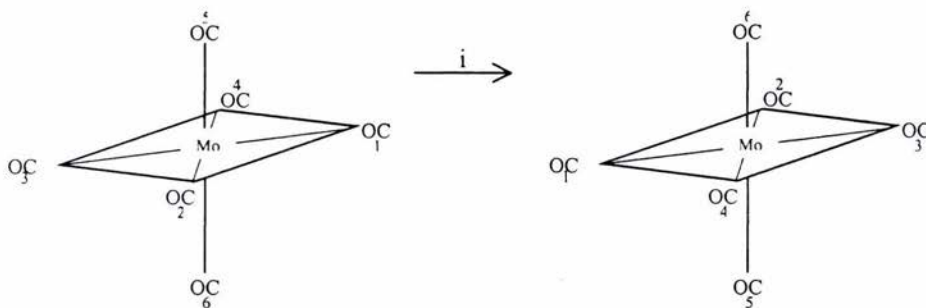


Figura 2.10. Inversión de la molécula de  $\text{Mo}(\text{CO})_6$

Las operaciones de simetría se pueden aplicar a moléculas que cumplan con las propiedades de un *grupo*. Formalmente en matemáticas, un grupo se define por cuatro propiedades. Sean  $A, B, C$  tres elementos de un grupo:

1. Existe un elemento llamado identidad  $E$  o  $I$ , tal que al aplicarlo a otro elemento del grupo lo deja igual. El elemento  $I$  conmuta<sup>14</sup> con cualquier otro elemento del grupo,

$$I \cdot A = A \cdot I = A$$

2. El producto de la multiplicación<sup>15</sup> de cualesquiera dos operadores deberá ser un elemento del grupo. Se dice que el grupo es cerrado bajo la operación de la multiplicación,

$$A \cdot B = C$$

3. La multiplicación es asociativa,

$$A \cdot (B \cdot C) = (A \cdot B) \cdot C$$

4. Para cada operador  $A$  de un grupo, existe un elemento  $A^{-1}$ , llamado *inverso*, tal que

$$A \cdot A^{-1} = I$$

## 2.7 Grupos puntuales.

Un grupo puntual<sup>16</sup> es aquel que está constituido por todos los elementos de simetría que posee una molécula. En la naturaleza existen 32 grupos puntuales que cubren todas las operaciones de simetría de las moléculas.

Es posible relacionar uno o varios elementos de simetría con la configuración de una molécula de tal manera que cumplan con las propiedades de un grupo. Las simetrías están ligadas con sus modos normales de vibración y permiten un estudio simplificado de las mismas. Un análisis más profundo y detallado queda fuera del objetivo de esta tesis.

---

<sup>14</sup> *Commutar* se utiliza en el mismo contexto que los operadores cuánticos. En particular si la multiplicación es conmutativa para todos los elementos del grupo, éste se llama *abeliano*.

<sup>15</sup> En este contexto la palabra multiplicación se usa para designar la aplicación de un operador sobre otro. Por ejemplo si  $A$  y  $B$  son dos operadores  $AB=C$  significa que el operador  $A$  aplicado al  $B$ , sea cual sea su definición, dará como resultado el operador  $C$ .

<sup>16</sup> Se llaman grupos *puntuales* porque al menos un punto queda fijo al aplicar cualquier operación de simetría. Existen también los grupos *espaciales*, utilizados en cristalografía, donde existe la operación de translación.

## Capítulo 3

### Dispositivos experimentales

#### 3.1 Introducción

Existen básicamente dos tipos de espectrómetros infrarrojos: los *dispersivos*<sup>17</sup> y los *interferométricos*<sup>18</sup>. El principio del funcionamiento de ambos es muy parecido y sus elementos se representan esquemáticamente en la figura 3.1. La muestra se coloca frente a una fuente de radiación infrarroja (IR). Ésta absorbe aquella energía correspondiente a la diferencia de los estados de excitación permitidos por la regla de selección (2.11). La radiación que llega al dispositivo espectral se descompone en sus correspondientes longitudes de onda. El detector convierte la radiación incidente en señales eléctricas que posteriormente se amplifican y finalmente se despliegan en una computadora. A continuación se tratará con mayor detalle el funcionamiento del espectrómetro por transformada de Fourier, utilizado en el desarrollo de este trabajo.



Figura 3.1 Los componentes principales de un espectrómetro IR.

#### 3.2 Elementos de un espectrómetro IR por transformada de Fourier

Una fuente de radiación IR, un interferómetro de Michelson como dispositivo espectral y un detector, constituyen los elementos esenciales de un espectrómetro IR por transformada de Fourier (FTIR). La disposición de cada uno de ellos aparece en la figura 3.2.

La fuente IR, emite un haz que abarca toda la banda infrarroja e incide en un divisor de haz. La radiación se separa en dos caminos mutuamente perpendiculares: uno se dirige al espejo fijo  $E_F$  y el segundo al espejo móvil  $E_M$ . La energía de cada uno de los rayos fragmentados es aproximadamente la mitad de la energía del haz incidente.

<sup>17</sup> Los espectrómetros dispersivos utilizan un prisma o una rejilla de difracción para separar la radiación que pasa a través de la muestra.

<sup>18</sup> También llamados espectrómetros por transformada de Fourier.



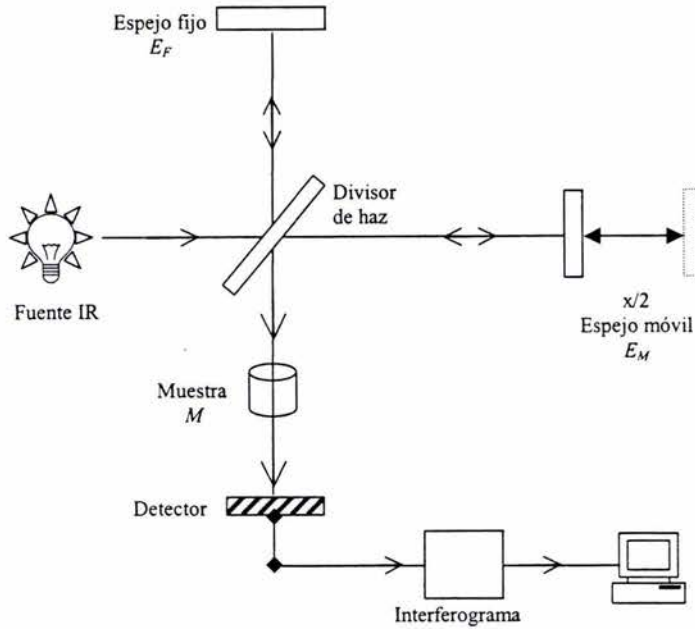


Figura 3.2. Diagrama básico del funcionamiento de un espectrómetro por transformada de Fourier.

Al reflejarse en los espejos, los dos haces de luz IR se recombinan cuando llegan nuevamente al divisor de haz donde se da lugar una interferencia constructiva o destructiva dependiendo de la posición del espejo móvil con respecto al espejo fijo. El haz resultante incide sobre la muestra donde se lleva a cabo la absorción de las energías de vibración características de la misma. Finalmente el detector convierte la radiación en señales eléctricas.

La intensidad registrada por el detector es

$$I(x) = I_0 \cos^2(\varphi/2) \quad \text{Ec. (3.1)}$$

donde  $I_0$  es la intensidad inicial

$$y \quad \varphi = \frac{2\pi x}{\lambda} = 2\pi \frac{\nu}{c} x \quad \text{Ec. (3.2)}$$

es la fase cuando la diferencia de caminos ópticos entre los espejos fijo y móvil es  $x$ , lo cual sucede cuando el espejo se deslaza una distancia  $x/2$ , siendo  $\nu$  la frecuencia de la onda y  $x$  la distancia recorrida por el haz de luz

Si se define  $B(\nu)$  como la función que describe al espectro de la muestra, entonces

$$I(x) = \int_0^{\infty} B(\nu) \cos^2\left(\frac{\pi}{c} x \nu\right) d\nu = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} B(\nu) \left(1 + \cos 2\pi \frac{\nu}{c} x\right) d\nu \quad \text{Ec.(3.3)}$$

La función

$$J(x) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} B(\nu) \cos\left(2\pi \frac{\nu}{c} x\right) d\nu \quad \text{Ec. (3.4)}$$

se conoce como interferograma.

Utilizando la transformada de Fourier del coseno, se puede encontrar un valor para el espectro  $B(\nu)$  a partir del interferograma  $J(x)$

$$B(\nu) \approx \int_0^{\infty} J(x) \cos\left(2\pi \frac{\nu}{c} x\right) dx \quad \text{Ec. (3.5)}$$

Finalmente una computadora realiza el cálculo aproximado de la transformada de Fourier del interferograma.

### 3.3 Ley de Beer-Lambert<sup>19</sup>

La relación entre la radiación IR que llega al detector y la concentración de la muestra  $C$ , se conoce como la ley de Beer-Lambert.

En la figura 3.3, un haz incidente representa la cantidad de radiación que pasa a través de  $1 \text{ cm}^2$  de la superficie de la muestra por segundo. La disminución de la cantidad de radiación  $-dI$  que pasa a través del segmento diferencial de la muestra  $db$ , es proporcional a la cantidad de radiación  $I$ , por segundo y por centímetro cuadrado disponible para la absorción de la muestra, y al número de moléculas capaces de absorber la radiación en la sección transversal de incidencia. Lo anterior queda representado en la ecuación

$$-dI = aCIdb \quad \text{Ec. (3.6)}$$

siendo  $a$  un factor de proporcionalidad<sup>20</sup>.

Integrando la ecuación 3.6 obtenemos

$$\ln \frac{I}{I_0} = -abC \quad \text{Ec. (3.8)}$$

en donde  $I$  representa la energía transmitida por la muestra,  $I_0$  la energía del haz incidente y el cociente  $I/I_0$  representa la relación de transmisión del material de estudio.

<sup>19</sup> Algunos autores también la nombran como ley de Beer-Bouguer.

<sup>20</sup> El valor de  $a$  depende de la molécula absorbente para una frecuencia en particular y de las unidades para expresar  $C$  y  $b$ .

Cabe mencionar que en este trabajo no se pretende hacer un análisis cuantitativo de las muestras. Simplemente se intenta comparar, cualitativamente, algunas de sus propiedades en común.

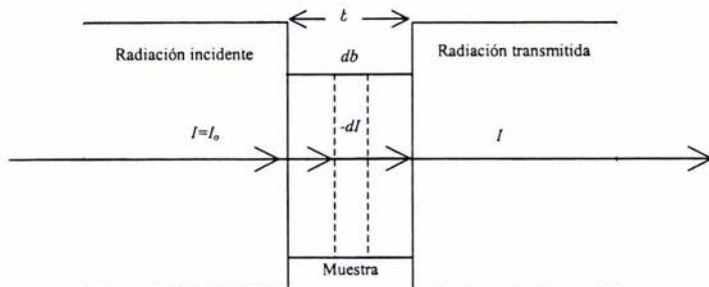


Figura 3.3. Disminución de la energía radiante como resultado de la absorción. Ley de Beer-Lambert.

### 3.4 Arreglo experimental

Se utilizó un espectrómetro por transformada de Fourier *Nicolet System 800* con resolución de  $4 \text{ cm}^{-1}$  el cual queda representado en la figura 3.4. La fuente de radiación IR se conoce como globar (glow bar) y es un cilindro de carburo de silicio (SiC) que se calienta mediante una corriente eléctrica de alto voltaje emitiendo como un cuerpo negro con temperaturas cercanas a los  $1,700^\circ \text{ C}$ . El divisor de haz es una ventana de bromuro de potasio y el detector empleado está hecho de sulfato de triglisina (TGS) el cual convierte la radiación en una señal eléctrica.

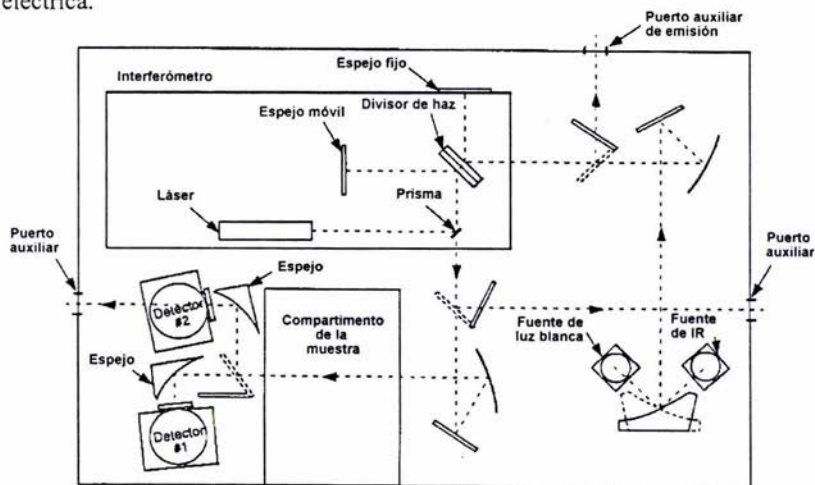


Figura 3.4. Diagrama del espectrómetro por transformada de Fourier *Nicolet System 800*.

Algunas ventajas de los espectrómetros por transformada de Fourier con respecto a los espectrómetros dispersivos son los siguientes:

- i. El espectrograma se obtiene en tiempos del orden de segundos mientras que los espectrómetros dispersivos se obtiene entre diez y quince minutos. Esto se debe a que el detector puede realizar un lectura de todas las frecuencias de manera simultánea.
- ii. La fuente de radiación no calienta de forma considerable la muestra ya que no se encuentra enfrente de ella.
- iii. La muestra se coloca después del interferómetro y antes del detector. De esta manera se logra hacer despreciables las contribuciones que podría emitir la muestra, ya que el detector sólo responde a las frecuencias que son moduladas por el interferómetro.

## Capítulo 4

### Materiales

#### 4.1 Leches en polvo

Se trabajó con nueve leches comerciales en polvo obtenidas en tiendas de auto servicio de la ciudad de México (una de ellas elaboradas con soya), y con caseína, suero de leche, caseinatos y proteína concentrada de soya proporcionados por la PROFECO<sup>21</sup>. La información al consumidor que ofrece cada leche aparece en la tabla 4.1.

Las primeras cuatro leches mostradas en la tabla 4.1, *Nido*, *Nido Kinder 1*, *Svelty* y *Carnation Clavel*, son fabricadas por la compañía Nestlé de México; *Alpura* y *Fortileche* por Industrializadora de Leche de Delicias S.A. de C.V.; *Nutrileche* es elaborada por Mexilac S.A. de C.V; *Leche Entera Comercial Mexicana* de fabricación desconocida, proporciona una dirección en el Estado de México. Las leche de soya *D'Trigo's* es elaborada por Nutrisa S.A. de C.V y Servicios Alimenticios Avanzados S.A. de C.V. respectivamente; *Parmalat primer crecimiento* es fabricada por Parmalat de México S.A. de C.V, mientras que la leche *Tenutre*, la fabrica Liconsa S.A. de C.V.

En promedio el precio de las leches en polvo comerciales oscila alrededor de los 25 pesos en presentación de 400 gramos. Las leches de soya son aproximadamente del mismo precio pero en presentaciones de menor cantidad (180 g). En contraste, la leche más económica es la repartida por la paraestatal Liconsa cuyo precio es de 3.5 pesos por 240 gramos de polvo.

#### 4.2 Preparación de muestras

Para obtener el espectro de las sustancias, fue necesario elaborar pastillas en bromuro de potasio (KBr)<sup>22</sup>. El procedimiento para fabricar cada una de ellas se explica a continuación.

Se preparó una mezcla de 300 mg a una concentración de 4% de la sustancia a estudiar<sup>23</sup> en KBr. Posteriormente, se colocaron 75 mg de la mezcla en un empastillador<sup>24</sup> que, al comprimirlo, formó pastillas de 7 mm de diámetro y 1 mm de espesor en promedio. El

<sup>21</sup> Procuraduría Federal del Consumidor.

<sup>22</sup> El KBr es un material transparente a la radiación IR.

<sup>23</sup> Se fabricaron pastillas a una concentración de 2%, 3%, 5% y 7% y se obtuvieron sus espectros. La pastilla al 4% de concentración presentó un espectro con mayores condiciones de análisis.

<sup>24</sup> La cantidad sugerida por el fabricante del empastillador es de 75 a 80 mg.

dispositivo para fabricar las pastillas no cuenta con un medidor de presión y en consecuencia, a pesar de que las dimensiones de cada muestra variaron según la fuerza ejercida sobre él, éstas no presentaron cambios significativos en los resultados. Finalmente la pastilla se colocó en un porta muestra y se introdujo en el espectrómetro para sacar su espectro según lo descrito en la sección 3.2. Se elaboraron dos pastillas diferentes por cada sustancia y se obtuvieron sus espectros.

Leche	Ingredientes	Contenido proteico en 1 litro de leche reconstituida	Precio en pesos por 1 litro de leche reconstituida	1 litro de leche reconstituida
Nido	Leche entera de vaca, lecitina de soya, sulfato de zinc, vitaminas A y D,	39.6g	8.73	150 g de polvo 1000 ml de agua
Nido I	Leche descremada, aceite de maíz, azúcar, sólidos de leche, oligofruktosa, miel de abeja, maltodextrina, lecitina de soya, vitaminas A, B, C, D y E, taurina, sulfato ferroso, sulfato de zinc, niacina, pantotenato de calcio, yoduro de potasio, ácido fólico y biotina.	25.09g	8.86	130 g de polvo 900 ml de agua
Svelty	Leche descremada de vaca y grasa butírica, oligofruktosa e inulina, carbonato de calcio y micronutrientes (vitaminas A, B, C, D, E, K, pirofosfato férrico, niacina, sulfato de zinc, pantotenato de calcio, ácido fólico, biotina, yoduro de potasio), lecitina de soya.	9.4g	9.12	120 g de polvo 935 ml de agua
Carnation	Leche descremada, grasa vegetal, lecitina 0.2%, vitaminas A, D <sub>3</sub> y E	34.3g	6.80	130 g de polvo 900 ml de agua
Alpura	Leche entera, lecitina 0.2%, vitaminas A y D	31.2g	6.08	120 g de polvo 900 ml de agua
Fortisleche	Leche descremada, grasa vegetal, lecitina 0.2%, vitamina A	31.2g	6.0	120 g de polvo 900 ml de agua
Nutrilache	Leche, leche descremada, sólidos de leche, grasa vegetal, carragenina, alginato de sodio, goma guar, mono y diglicéridos de los ácidos grasos, citrato de sodio y fosfato de sodio, 0.2% de lecitina de soya.	22.8g	6.5	120 g de polvo 920 ml de agua
Leche entera Comercial Mexicana	Leche entera de vaca, lecitina de soya 0.2%	25.3 g	7.20	125 g de polvo 960 ml de agua
D' Trigos leche de soya	Harina de soya desgrasada y cocida, adicionada con suero de queso de malta	25.98g	14.5	60 g de polvo 950 ml de agua
Parmalat primer crecimiento	Leche semidescremada, sacarosa, aceite de maíz, aceite de soya, lactosa, lecitina de soya, vitaminas y minerales	25.22g	8.55	130g de polvo 900 ml de agua
Tenutre	Leche en polvo adicionada con vitaminas, minerales y 0.2% de lecitina de soya.	31.2g	1.75	120 g de polvo 920 ml de agua

Tabla 4.1. Ingredientes de las once leches de estudio.

## Capítulo 5

### Resultados y conclusiones

#### 5.1 Análisis

De acuerdo a lo descrito en la sección 4.2, se obtuvieron los espectros de las leches en polvo mencionadas anteriormente. En la figura 5.1 se muestra el espectro de la leche *Alpura* en escala completa. La región de la grasa se ubica alrededor de la banda de  $1750\text{ cm}^{-1}$  (P1) y la región de las proteínas se encuentra entre los  $1500\text{-}1600\text{ cm}^{-1}$ (<sup>25</sup>P2), la región alrededor de los  $1450\text{ cm}^{-1}$  (P3), y de los  $1150\text{ cm}^{-1}$  (P4)<sup>26</sup>.

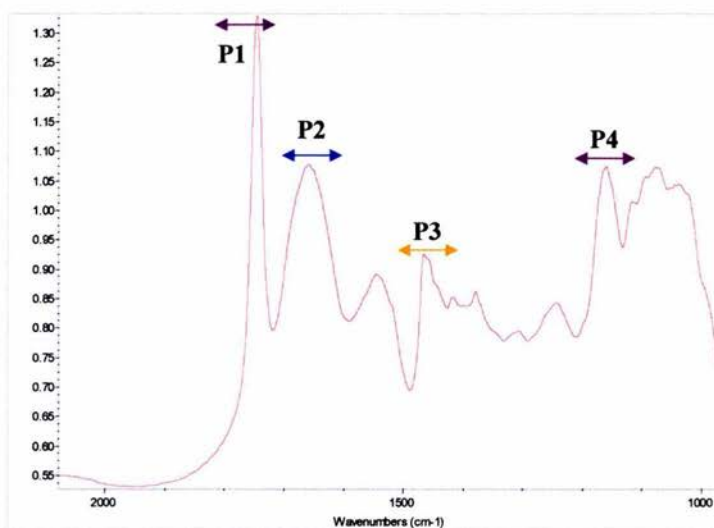


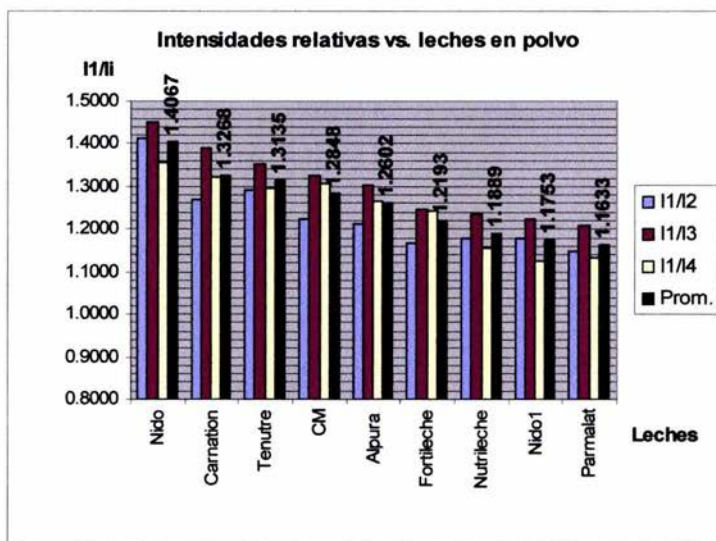
Figura 5.1. Espectro de la leche *Alpura* en polvo en escala completa. Se muestran también las cuatro bandas con las que se obtuvieron los cocientes y las regiones de las grasas y las proteínas

El análisis que se llevó a cabo consistió en comparar las intensidades relativas de cuatro de las bandas más intensas que presentan las leches *Nido*, *Carnation Clavel*, *Tenutre*, *Comercial Mexicana*, *Alpura*, *Fortileche*, *Nutrileche*, *Nido 1* y *Parmalat*. Se calculó el cociente de la primera banda, P1, ( $1745\text{ cm}^{-1}$ ) correspondiente a la grasa contenida en la

<sup>25</sup> Heuer C, *Determination of Acetone in Cow Milk by Fourier Transform Infrared Spectroscopy of the Detection of Subclinical Ketosis*, en American Dairy Science Association, 2001, 84:575-582

<sup>26</sup> Chen, M, Irudayaraj J, *Sampling Technique for Cheese Analysis by FTIR Spectroscopy*, en Journal of food science, Vol. 63, No. 1, 1998.

leche<sup>27</sup>, con las tres bandas restantes ubicadas alrededor de  $1664\text{ cm}^{-1}$ , P2, (zona de las proteínas),  $1465\text{ cm}^{-1}$  y  $1196\text{ cm}^{-1}$  respectivamente (ver figura 5.1). Los resultados se muestran en la gráfica 5.1 donde la columna de negro indica el promedio de los tres cocientes anteriores. Es clara la separación del grupo de leches, lo cual permite afirmar que sus componentes difieren entre sí; más aún, las leches que presentan la leyenda de “leche entera”, oscilan en promedio cerca de 1.3184 unidades mientras que las “descremadas” *Fortileche*, *Nutrileche*, *Nido 1* y *Parmalat* (adicionadas con aceite de maíz o grasa vegetal) lo hacen alrededor de 1.1867 unidades.



Gráfica 5.1. Intensidades relativas de las cuatro bandas principales de las leches de estudio

Cabe mencionar que la leche *Carnation Clavel* ofrece al consumidor leche entera con grasa vegetal la cual es comparable con la leche entera *Nido* de la misma marca, lo cual hace suponer que las fórmulas lácteas de ambas presentan un gran parecido en las diferetes “grasas” empleadas.

También llama la atención que *Alpura* y *Fortileche*, elaboradas por la misma casa, presentan similitudes en sus espectros que complican su identificación, a pesar de tener denominaciones de leche entera y leche descremada con grasa vegetal respectivamente,

<sup>27</sup> Andersen, Oteen, *Vibrational Spectroscopy in the Analysis of Dairy Products and Wine*, Handbook of Vibrational Spectroscopy, Ed. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2002



permitiendo suponer que no existen grandes diferencias en los componentes utilizados en su fabricación. Las leches *Nido* y *Nido 1* presentan un espectro similar entre ellas y a las dos leches anteriores, sin embargo se pueden diferenciar en sus intensidades (ver la figura 5.2).

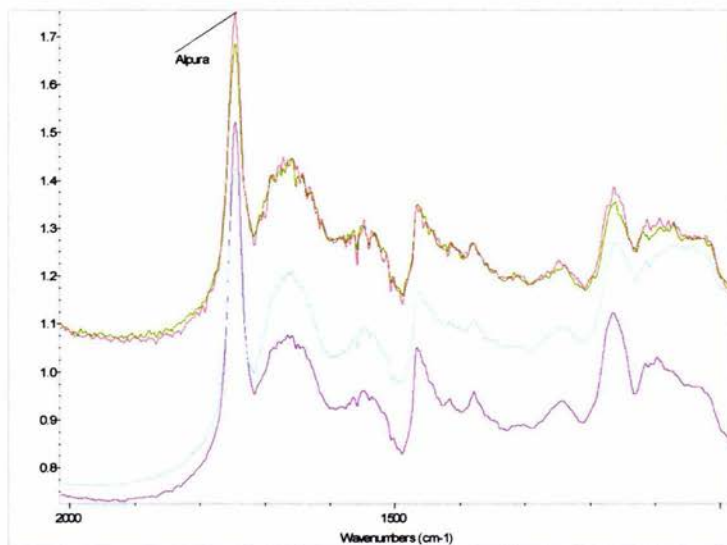


Figura 5.2 Los espectros en escala común de las leches *Alpura* (rojo) y *Fortileche* (verde) son muy similares mientras que los de *Nido 1* (azul) y *Nido entera* (Morado) presentan diferencias en sus intensidades..

Por otro lado, en la figura 5.3 se muestran los espectros de la leches *Svelty* y *Nido entera*. La leche descremada no presenta la banda de  $1745\text{ cm}^{-1}$  correspondiente a la grasa la cual concuerda con la información proporcionada al consumidor mostrando la leyenda “leche descremada, de vaca y grasa butírica”<sup>28</sup>, mientras que la leche entera sí la presenta.

Posteriormente, se comparan los espectros obtenidos de la leche de soya *D’Trigo’s* con el de la proteína de soya y caseinatos<sup>29</sup> provistos por la PROFECO, ver figura 5.4 Se observa el gran parecido entre los tres espectros en la región de  $1200\text{ a }1700\text{ cm}^{-1}$ . De los espectros no se puede llegar a la conclusión respecto a si la leche de soya contiene o no caseinatos.

<sup>28</sup> La grasa butírica es grasa de origen animal.

<sup>29</sup> Se denomina caseinato al producto alimenticio obtenido por solubilización de la caseína rehidratada o fresca, por la acción de agentes neutralizantes, sometida a pasteurización, deshidratación o no. NOM-155-SCFI-2003, publicada en el Diario Oficial el 12 de septiembre de 2003.

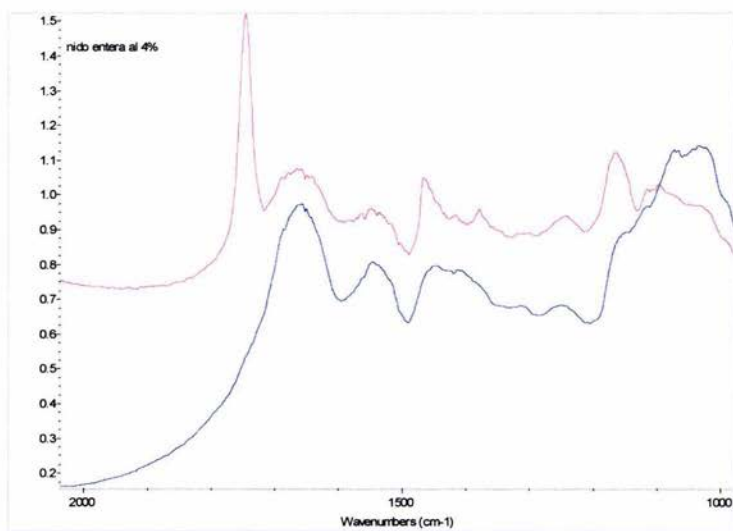


Figura 5.3 Espectros de la leches descremada Svelty (en azul) y entera Nido ambas de Nestlé.

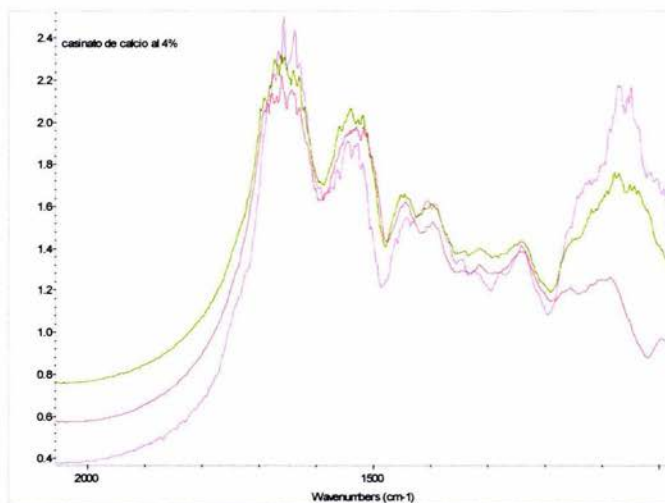


Figura 5.4 Espectros de la proteína de soya (verde), la leche de soya D'Trigo's fabricada por Nutrisa (rosa) y caseinatos (rojo).

Finalmente se compararon los espectros de la caseína, caseinatos y proteína de soya contra la leche entera *Nido*. Los resultados se muestran en la gráfica 4.5. Como se mencionó anteriormente el espectro de la soya (en rojo), es muy similar al de los caseinatos (en verde). Ambos muestran una intensidad mayor con respecto a la leche *Nido* (en rosa) y la caseína (en azul).

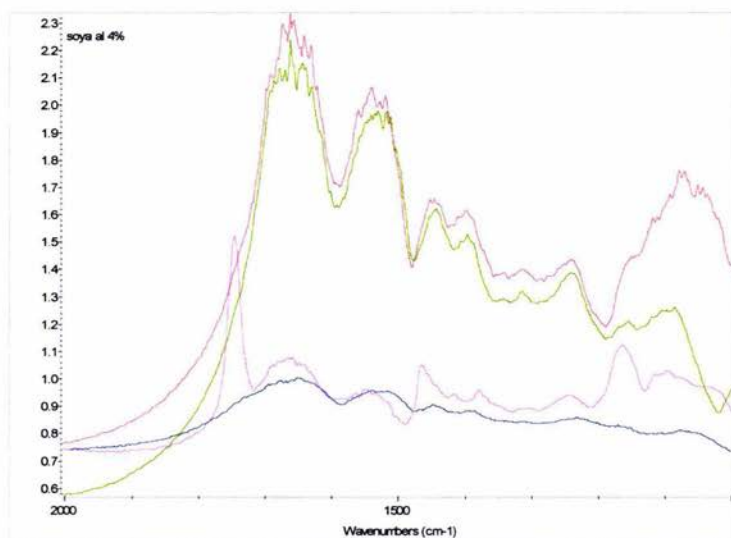


Figura 4.5. Espectros de la proteína concentrada de soya (rojo), caseinatos (verde), leche *Nido* (rosa) y caseína (azul).

## 5.2 Conclusiones

La Secretaría de Salud está preocupada por contar con un método cuantitativo que permita determinar la calidad de las leches comerciales que se venden en el país. La EIR resulta una herramienta útil en esta dirección, ya que los espectros de alta resolución se pueden obtener en tiempos relativamente cortos (del orden de segundos) y permiten la identificación de las diferentes sustancias que intervienen en su composición; particularmente las grasas y las proteínas. La motivación inicial de este trabajo fue desarrollar tal tipo de metodología, aunque los resultados obtenidos sólo representan el inicio de ésta, debido a que el origen vegetal o animal de las grasas y proteínas es muy difícil de determinar en virtud de su composición.

Sin embargo se obtuvieron resultados significativos al estudiar los espectros de

distintas leches en polvo:

Calculando los cocientes de las intensidades relativas de diferentes bandas para cada leche, se puede hacer una separación entre las leches enteras, las leches semidescremada y las leches descremadas.

De hecho, sólo en la leche *Svelty* está ausente la banda entre 1700-1800  $\text{cm}^{-1}$  característica de las grasas, de tal forma que se puede decir que de las lechas estudiadas, ésta es la única verdaderamente descremada.

Es notable que los espectros de dos leches con marca diferente -*Alpura* y *Fortileche*- pero fabricadas por la misma compañía, son esencialmente idénticos sólo diferenciándose por una intensidad ligeramente menor de la banda asociada con las grasas en el caso de la segunda.

Al comparar los espectros de la *Leche Entera Nido* y de la *Carnation Clavel*, llama la atención el hecho de que la banda asociada con las grasas es esencialmente la misma en ambas leches, a pesar de que en el primer caso (según el fabricante) las grasas son de origen animal y en el segundo (según el fabricante) son de origen vegetal. Cabe recalcar que el fabricante de *Carnation* no especifica qué tipo de grasa vegetal utiliza, pero podemos asegurar que es distinta, o al menos que interviene en una proporción notablemente diferente, a las del aceite de maíz que el fabricante de *Nestlé* especifica en la leche *Nido 1*.

No hay duda en que la leche de soya, *D'Trigo's* de este estudio, es "leche descremada". A pesar de que el espectro de la soya y los caseinatos es muy parecido, hay indicios en la región de 1000 a 1200  $\text{cm}^{-1}$  de que lo que interviene en su fabricación sea efectivamente soya.

Aunque los resultados obtenidos en este trabajo no son concluyentes en virtud de la semejanza entre los espectros de proteínas y de grasas de orígenes distintos (animal y vegetal), sí representa un primer paso en el desarrollo de una metodología cuantitativa, eficiente, rápida y apropiada para la determinación de la calidad de las leches comerciales.

La complementación de este trabajo requiere su extensión a la leche en su forma más común (líquida), lo cual es un problema técnico sencillo de resolver. Además casi con toda certeza la utilización de radiación IR polarizada permitiría afinar los espectros cuantitativos

que tal vez permitieran distinguir con claridad espectros que con luz del espectro visible resultan semejantes.

## BIBLIOGRAFÍA

1. HAUROWITZ, Felix, Química y función de las proteínas, Ediciones Omega, Barcelona 1969.
2. SCHRADER, Bernhard, Infrared and raman spectroscopy, Verlagsgesellschaft mbH, Alemania, 1995.
3. MERZBACHER, H, Quantum Mechanics, Segunda edición, John Wiley and Sons, 1970.
4. Manual de operación del espectrómetro FT-IR. Editado por Nicolet Analytical Instruments, 1990.
5. CONLEY, Robert, Espectroscopía infrarroja, Editorial Alambra, España 1979.
6. BADUI, Salvador, Química de los alimentos, Editorial Alambra Mexicana, 2ª Edición, México 1990.
7. WILSON, Eva, Principles of nutrition, 4<sup>th</sup> edition, John Wiley and Sons, 1979.
8. Heuer C, *Determination of Acetone in Cow Milk by Fourier Transform Infrared Spectroscopy of the Detection of Subclinical Ketosis*, en American Dairy Science Association, 2001, 84:575-582.
9. Chen, M, Irudayaraj J, *Sampling Technique for Cheese Analysis by FTIR Spectroscopy*, en Journal of food science, Vol. 63, No. 1, 1998
10. Andersen, Oteen, *Vibrational Spectroscopy in the Analysis of Dairy Products and Wine*, Handbook of Vibrational Spectroscopy, Ed. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2002.
11. Norma Oficial Mexicana NOM-155-SCFI-2003, publicada en el Diario Oficial el 12 de septiembre de 2003.
12. Imagen obtenida de *Hipertextos del Área de la Biología*, J.S. Raisman y Ana M. González, [www.biologia.edu.ar/macromoleculas/structup.htm](http://www.biologia.edu.ar/macromoleculas/structup.htm).