



Universidad
Zaragoza

Proyecto Fin de Carrera

Determinación de elementos mayoritarios en aguas tónicas

Autor

Lorena Abadía Ortín

Director

Angélica Fernández Castel

Escuela de Ingeniería y Arquitectura
2014



PROYECTO FIN DE CARRERA

DETERMINACIÓN DE ELEMENTOS MAYORITARIOS EN AGUAS TÓNICAS

LORENA ABADÍA ORTÍN

DIRECCIÓN: ANGÉLICA FERNÁNDEZ CASTEL

ESPECIALIDAD: QUÍMICA INDUSTRIAL

CONVOCATORIA: SEPTIEMBRE 2014

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, agradecer a la Dra. Angélica Fernández su atención, paciencia y dedicación durante todo el tiempo que ha durado la realización de este proyecto, pues sin su ayuda no hubiese sido posible.

Asimismo al personal del laboratorio por facilitarme la ejecución del trabajo.

También me gustaría agradecer y sobre todo, dedicar este proyecto a mis familiares y amigos, por su apoyo durante todo este tiempo y en especial, a mi padre, que tras su lucha por la vida, empezó este arduo camino conmigo pero, el destino decidió que no iba a estar aquí para poder disfrutar este gran momento.

Muchas gracias a todos.

1. OBJETIVO.....	1
2. INTRODUCCIÓN.....	2
2.1. Aguas tónicas.....	2
2.2. Potasio.....	3
2.3. Magnesio.....	3
2.4. Calcio.....	4
2.5. Sodio.....	4
2.6. Método de análisis instrumental.....	5
3. MATERIALES Y EQUIPOS.....	6
4. ESPECTRÓMETRO.....	6
5. REACTIVOS Y DISOLUCIONES.....	8
6. MUESTRAS.....	9
6.1. Listado de muestras analizadas	9
6.2. Tónicas Premium.....	10
6.3. Preparación de las muestras.....	12
7. ESTUDIO DEL CONTENIDO EN POTASIO.....	13
7.1. Parámetros instrumentales	13
7.2. Recta de calibrado.....	13
7.3. Análisis de muestras.....	14
7.4. Límite de detección.....	15
7.5. Estudio de recuperación.....	15
7.6. Adición estándar.....	16
8. ESTUDIO DEL CONTENIDO EN MAGNESIO.....	19
8.1. Parámetros instrumentales.....	19
8.2. Recta de calibrado.....	19
8.3. Análisis de muestras.....	20
8.4. Límite de detección.....	21
8.5. Estudio de recuperación.....	21

8.6. Adición estándar.....	23
9. ESTUDIO DEL CONTENIDO EN CALCIO.....	26
9.1. Parámetros instrumentales.....	26
9.2. Recta de calibrado.....	26
9.3. Análisis de muestras.....	27
9.4. Límite de detección.....	28
9.5. Estudio de recuperación.....	28
9.6. Adición estándar.....	30
10. ESTUDIO DEL CONTENIDO EN SODIO.....	33
10.1 Parámetros instrumentales.....	33
10.2 Recta de calibrado.....	33
10.3 Análisis de muestras	34
10.4 Límite de detección.....	35
10.5 Estudio de recuperación.....	35
10.6 Adición estándar.....	37
11. CONCLUSIONES.....	40
11.1 Resumen rectas de calibrado.....	40
11.2 Resumen estudios recuperación.....	40
11.3 Resumen adiciones estándar.....	41
11.4 Comparación concentraciones bibliográficas y experimentales.....	42
11.5 Concentraciones de elementos según el tipo de muestra analizada.....	43
11.6 Comparación de valores medios.....	47
12. BIBLIOGRAFÍA.....	48
13. ÍNDICE DE TABLAS.....	49
14. ÍNDICE DE FIGURAS.....	51

1. OBJETIVO

El presente proyecto tiene por objeto determinar, por medio de la espectroscopía de absorción atómica de llama, la concentración, en mg/L, de potasio, magnesio, calcio y sodio presentes en diferentes aguas tónicas.

Se llevarán a cabo estudios de recuperación y comparación de los resultados obtenidos con diferentes métodos de calibración.

Finalmente se realizará un estudio comparativo entre diferentes marcas y tipos que se encuentran en el mercado, así como una comparación con datos bibliográficos.

2. INTRODUCCIÓN

2.1 El agua tónica

El agua tónica, o simplemente, tónica es un refresco carbonatado aromatizado con quinina. La bebida toma el nombre de los efectos médicos de este aromatizante amargo. La quinina es un alcaloide que se extrae de la corteza del árbol de la quina, y tiene propiedades tónicas digestivas y nerviosas (de ahí el nombre de la bebida), antipiréticas, analgésicas y antimaláricas.

La bebida surgió al añadir quinina al agua carbonatada como medida de profilaxis contra la malaria. Su consumo inicial se limitaba a las colonias inglesas de las zonas tropicales de Asia y África; pero luego se extendió por todo el mundo.

Originalmente, la fórmula de la tónica sólo incluía agua carbonatada y quinina, con grandes proporciones de esta última, lo que provocaba un sabor muy amargo. Cuenta entre sus ingredientes el ácido cítrico y el azúcar para mitigar un poco el sabor amargo de la quinina. Con el paso del tiempo la cantidad de quinina se ha reducido a cantidades insignificantes desde el punto de vista médico, debido a los efectos secundarios que tienen altas dosis de esta sustancia, por lo que ahora se usa sólo en cantidades equivalentes a cinco milésimas partes de la dosis terapéutica y únicamente por su sabor.

La tónica es usada con frecuencia en una bebida llamada gin tonic, que es una mezcla de ginebra y agua tónica. Aparte de las versiones estándar de la bebida, también se venden versiones sin azúcar o aromatizadas con limón (limón amargo) o lima (lima amarga). La bebida brilla bajo luz ultravioleta debido a la fluorescencia natural del sulfato de quinina presente en ella. [1]

El empleo de quinina en dosis terapéuticas o excesivas puede causar un síndrome reversible denominado cinchonismo, con manifestaciones tóxicas que incluyen: trastornos gastrointestinales, visuales, auditivos, efectos cardiovasculares y neurológicos; así como cefaleas, confusión, coma, ceguera e incluso psicosis. [2]

2.2 Potasio

El contenido de potasio del organismo humano es de unos 2 g/kg. Su consumo en la alimentación ordinaria alcanza 2 – 5,9 g/día, las necesidades medias son del orden de 782 mg.

Se encuentra localizado principalmente en las células, regula la presión osmótica celular, participa en la excitabilidad de la célula y activa una serie de enzimas.

2.2.1 Carencia de potasio

La deficiencia de potasio puede producirse por un consumo pobre con los alimentos o por un aporte excesivo de alimentos pobres en potasio. También puede observarse en algunos tratamientos con toma de diuréticos, régimen estricto sin sal y abuso de laxantes. [3][4]

2.2.2 Exceso de potasio

Únicamente se da en caso de aportes excesivos, sobre todo por medio de medicamentos. [4]

2.3 Magnesio

El contenido de magnesio del hombre es de unos 200 mg/kg y el aporte deseado, del orden de 300 – 500 mg/día. Con la alimentación ordinaria se reciben unos 300-500 mg/día.

El magnesio se utiliza como componente y activador de numerosas enzimas, especialmente aquellas que producen fosfatos ricos en energía, el magnesio es un elemento vital. [3]

2.3.1 Carencia de Magnesio

La cantidad de magnesio aportada por una dieta normal puede ser insuficiente, estas carencias pueden traducirse en fatiga, dolores musculares, calambres, etc. [4]

2.3.2 Exceso de Magnesio

Las intoxicaciones por magnesio son raras y conllevan un descenso de la tensión arterial, náuseas, somnolencia y problemas cardíacos. [4]

2.4 Calcio

El contenido de calcio del hombre es de 1500 g. El aporte de calcio deseable es de 0,8-1 g/día, se suele cubrir con el consumo medio de alimentos, que es del orden de 0,8-0,9 g/día.

El calcio ocupa una posición central entre las sustancias minerales del organismo tanto cuantitativamente como por su universal existencia; se encuentra en el esqueleto y en otros tejidos. A consecuencia de su gran importancia para la construcción del sistema óseo, la coagulación de la sangre y la contracción del músculo, el calcio es un componente esencial de la alimentación. [3]

2.4.1 Carencia de calcio

Pueden observarse deficiencias de calcio cuando hay carencias de vitamina D, que es necesaria para su absorción, y en el curso de ciertas enfermedades y tratamientos. Estas deficiencias pueden conducir a un descenso de calcio en la sangre que puede implicar problemas neuromusculares y, a la larga, problemas a nivel de la piel, los dientes, el cabello, las uñas y los huesos (osteomalacia en adultos y raquitismos en niños) [4]

2.4.2 Exceso de calcio

La absorción intestinal exagerada del calcio es rara y puede conducir a un aumento de la tasa de calcio en sangre, fuente de numerosos problemas como vómitos, insuficiencia renal, calcificaciones de los tejidos o problemas cardíacos.

La intoxicación por vitamina D es la causa principal de este exceso. [4]

2.5 Sodio

El contenido en sodio del organismo humano es del orden de 1,4 g/kg. Las necesidades de sodio del adulto pueden alcanzar un valor medio de unos 460 mg/día y su consumo diario es de unos 1,7 a 6,9 g/día.

El principal papel del sodio es actuar regulando la presión osmótica de los líquidos extracelulares, además de activar algunas enzimas como, por ejemplo, la amilasa. [3]

2.5.1 Carencia de Sodio

La falta de sodio, que implica una hidratación excesiva de las células y una deshidratación de los líquidos extracelulares, no es posible más que en circunstancias anormales como diarrea, vómitos o transpiración excesiva. [4]

2.5.2 Exceso de sodio

Una alimentación demasiado rica en sodio favorece la hipertensión arterial en las personas predispuestas a esta enfermedad, lo cuan desencadena una insuficiencia cardíaca, hepática o renal. [4]

2.6 Método de Análisis Instrumental

El método utilizado para llevar a cabo este estudio es la **Espectroscopía de Absorción Atómica de llama**. Se usa para la determinación cualitativa y cuantitativa de unos 70 elementos. La principal característica de este método es la rapidez, la comodidad, la notable selectividad, el coste moderado y la sensibilidad.

El estudio espectroscópico de átomos con radiación UV y visible solo puede hacerse en fase gaseosa, por eso el primer paso en estos procedimientos es la atomización, un proceso por el cual una muestra se volatiliza y se descompone de forma que produce un gas atómico que se mezcla con el combustible gaseoso y oxidante para arrastrarla al mechero. Este es el paso crítico, puesto que el rendimiento y la reproducibilidad de la atomización, determina la sensibilidad, precisión y exactitud del método.

La EAA se basa en fenómenos de absorción, fluorescencia y emisión. Nos da información sobre la identidad y concentración de átomos de una muestra

3. MATERIALES Y EQUIPOS

Para la realización de este estudio se emplearon:

- Matraces de 250, 100, 50, 25 y 10 mL
- Vasos de precipitados de 50 y 100 mL
- Vidrios de reloj
- Pipetas aforadas de 0,5, 1, 2, 3, 4, 5 y 10 mL
- Pipetas graduadas de 1 y 5 mL
- 1 pipeteador
- Balanza analítica modelo TE214S (Sartorius)
- Equipo de ultrasonidos (JP Selecta)
- Espectrofotómetro de absorción atómica de llama modelo 55AA (Agilent Technologies)

4. ESPECTRÓMETRO

Se ha usado el espectrómetro de absorción y emisión atómica de llama (Agilent Technologies), con llama de aire-acetileno y lámparas de cátodo hueco de potasio (Varian), magnesio (Varian), calcio (GBC) y sodio (SPC Science).

Antes de comenzar el análisis, además de esperar 10 minutos para que se estabilice el equipo, una vez encendido y seleccionado el elemento, se deben ajustar una serie de parámetros instrumentales:

- Absorbancia o Emisión
- Longitud de onda: se ajusta según las recomendaciones del equipo en función del rango de concentraciones que se vaya a medir.
- Caudal de aire y de acetileno: 750 KPa para aire y 75 KPa para acetileno son los recomendados, aunque el caudal de acetileno se puede modificar.
- Altura y profundidad del mechero: El equipo permite la modificación de ambas, pero solo se puede medir la primera mediante unidades arbitrarias. La profundidad se ajusta haciendo coincidir la radiación de la lámpara con la marca de una tarjeta proporcionada por el fabricante del equipo, antes de encender la llama.
- Anchura de rendija: Se selecciona automáticamente la recomendada por el equipo, aunque es posible elegir entre varias opciones que te proporciona.

- Intensidad de lámpara: La selecciona de forma automática el equipo, también se puede modificar mediante varias opciones.
- Posición de la lámpara: Para comprobar si está en la posición correcta horizontalmente, se manipula mediante dos tornillos, buscando así un máximo de señal en la pantalla de optimización. Además, este equipo permite tener puestas dos lámparas a la vez, por lo que se selecciona la lámpara 1 o 2 en función de la que se va a utilizar.
- Tiempo de lectura: 5 s
- Retraso de lectura: 5 s
- Nº de lecturas: 5
- Modo de medida: Integración.

Una vez están todos los parámetros fijados, y tras comprobar la ganancia y la señal, en la pantalla de parámetros de calibración se ajusta el cero introduciendo el capilar en la solución del blanco (solo contiene HCl, LaCl₃ y agua desionizada). Posteriormente, se introducen las disoluciones patrón preparadas para la recta de calibrado (de 1 a 5) y se aspiran en orden, de modo que se registran las absorbancias en el equipo. También es posible visualizar la recta en el equipo comprobando así su linealidad.

Seguidamente se aspiran las muestras, con la pantalla de resultados, para obtener sus valores de absorbancia, también se realizan medidas de los blancos para calcular el límite de detección. Cuando ya están calculadas las concentraciones de las muestras, se lleva a cabo el estudio de recuperación y de adición estándar con varias muestras elegidas al azar para cada elemento.



1. Espectrómetro de absorción y emisión atómica de llama modelo 55AA (Agilent Technologies)

5. REACTIVOS Y DISOLUCIONES

- Agua desionizada: Obtenida mediante el equipo Elix 3 de Millipore, por intercambio de iones y ósmosis inversa.
- Lantano (III) cloruro heptahidratado para análisis (ACS Scharlau).
- Disolución al 10% (m/v) de lantano: Se pesan 25,1658 g de $\text{LaCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ y se diluyen con agua desionizada hasta un volumen de 250 mL. Esta solución se usa con el fin de evitar interferencias químicas durante la atomización, que alterarían las características de absorción del analito.
- Ácido Clorhídrico 37% grado analítico (ACS ISO Scharlau).
- Potasio, solución patrón 1000 mg/L K para AA. Nitrato de potasio en ácido nítrico 0,5 mol/L (Scharlau).
- Solución patrón de 10 mg/L de potasio: Se toma 1 mL de la disolución concentrada (1000 mg/L K) y se lleva a un volumen de 100 mL con agua desionizada.
- Magnesio, solución patrón 1000 mg/L Mg para AA. Nitrato de Magnesio en ácido nítrico 0,5 mol/L (Scharlau).
- Solución patrón de 10 mg/L de magnesio. Se toma 1 mL de la disolución concentrada (1000 mg/L Mg) y se llevan a un volumen de 100 mL con agua desionizada.
- Calcio, solución patrón 1000 mg/L Ca para AA. Nitrato de calcio en ácido nítrico 0,5 mol/L (Scharlau).
- Solución patrón de 50 mg/L de calcio: Se toman 5 mL de la disolución concentrada (1000 mg/L Ca) y se lleva a un volumen de 100 mL con agua desionizada.
- Sodio, solución patrón 1000 mg/L Na para AA. Nitrato de sodio en ácido nítrico 0,5 mol/L (Scharlau).
- Solución patrón de 10 mg/L de calcio: Se toma 1 mL de la disolución concentrada (1000 mg/L Na) y se lleva a un volumen de 100 mL con agua desionizada.

6. Muestras

6.1 Listado de muestras analizadas



2.1 Blue Tonic Kas lata (M1)



2.2 Schweppes Light lata (M2)



2.3 Schweppes lata (M3)



2.4 Nordic lata



2.5 Hacendado tónica lata



2.6 Berta tónica lata (M6)



2.7 Schweppes Limón Lata (M7)



2.8 Nordic botella plástico (M8)



2.9 Schweppes Original Premium Cristal (M9)



2.10 BO Tonic water flowers cristal (M10)



2.11 Original cristal



2.12 Seagrams cristal



2.13 INDI cristal (M13)



2.14 1724 cristal (M14)



2.15 ME tonic cristal (M15)



2.16 BO tonic water fruits Cristal (M16)



2.17 Fever-Tree cristal (M17)



2.18 Fever-Tree lemon cristal (M18)

6.2 Tónicas Premium

En la **Tónica Schweppes Premium** (M9), se han intensificado los aromas cítricos y añadido un toque de lima. [5]

La **Bö Flowers Tonic Water** (M10) es un agua tónica de carácter floral, elaborada con extractos naturales habituales como la quinina y con otros no tantos en una tónica como el de crisantemo, la pimienta rosa o las rosas. [6]

La **Original Classic** (M11) es un agua tónica Premium elaborada con extractos naturales de quinina y azúcar, de aspecto cristalino y posee un olor relativamente neutro. [6]

Seagram's (M12) es una tónica Premium que aparentemente tiene un aspecto cristalino, burbuja fina y persistente. Otorga aromas frescos, cítricos y quinina con tonos herbáceos. [7]

Indi & Co (M13) Esta tónica está fabricada de forma artesanal con elementos naturales, sin contener conservantes, ni edulcorantes, ni aromas artificiales. Algunos de sus botánicos son la

piel de naranja de Sevilla, la corteza de lima, la kewra, las semillas de cardamomo, el kalinji y la quinina, entre otros. [6]

La **1724 Tonic Water** (M14), está fabricada por el procedimiento tradicional, con agua mineral, quinina recogida a mano en el Camino del Inca, cuyo origen está a 1724 metros sobre el nivel del mar, y de ahí el nombre de esta tónica. Entre los cítricos que la componen, tiene una especial incidencia la mandarina. [6]

ME Tonic (M15) está hecha a base de agua carbonatada de manantial junto con quinina natural, yuzu japonés y pimienta negra. Desprende un sabor de corte clásico conjugado con la singularidad propia de los añadidos exóticos al agua y a la quinina. [6]

Bö Fruits Tonic Water (M16) es una agua tónica frutal, elaborada 100 % con productos naturales como la típica quinina, el membrillo, las endrinas o el lychee. [6]

Fever-Tree (M17) tónica, está fabricada por el procedimiento tradicional, con agua de manantial, quinina del Árbol de la Fiebre (Fever tree) de Ruanda, azúcar de caña, ácido cítrico, aceite de naranja y ralladura de limón. [6]

La **Fever-tree Lemon** (M18) es una tónica Premium totalmente natural. Es poseedora de un sabor y aroma a limones frescos, ya que incluye entre otros ingredientes limón de Sicilia, del cual se añade un extracto obtenido mediante el método “sfumatrice”, no se incorporan colorantes ni ningún tipo de aroma artificial o conservante. [6]

6.3 Preparación de las muestras

Las muestras se deben desgasificar, para ello se usa el equipo de ultrasonidos. [8]

Se realiza una dilución en medio ácido y con cloruro de lantano (10% La), de modo que las muestras contienen:

- 2 mL de muestra
- 2 mL de LaCl_3 (10%La)
- 1 mL de HCl concentrado (37% grado analítico)

Todas ellas llevadas a matraces de 25 mL con agua desionizada.

6.3.1 Excepciones

6.3.1.1 Estudio del contenido de Potasio

Se realizaron diluciones adicionales para las muestras 5, 14 y 18, puesto que se obtenían señales fuera de rango.

Se toma 1 mL de muestra, 2 mL de LaCl_3 (10% La) y 1 mL de HCl concentrado, todo ello enrasado con agua desionizada en matraz de 25 mL.

6.3.1.2 Estudio del contenido en Magnesio

Se hizo una dilución adicional para la muestra 16: Se tomaron 2 mL de la muestra ya preparada y se diluyó a 10 mL con la disolución del blanco.

6.3.1.3 Estudio del contenido en Calcio

Se hicieron diluciones adicionales para las muestras 10, 16, 17 y 18: se tomaron 5 mL de la muestra anteriormente preparada y se llevó a matraz de 10 mL con la disolución del blanco.

6.3.1.4 Estudio del contenido en Sodio

Se preparan todas las muestras de la siguiente forma:

- 1 mL de Muestra
- 2 mL de LaCl_3 (10%La)
- 1 mL de HCl concentrado (37% grado analítico)

Se realizan diluciones adicionales en las muestras 13, 14 y 16: se tomaron 5 mL de la muestra ya preparada y enrasada a 10 mL con la disolución del blanco.

7. ESTUDIO DEL CONTENIDO EN POTASIO

7.1 Parámetros instrumentales

- $\lambda = 766,5 \text{ nm}$
- Caudal de aire: 6 - 7 u.a.
- Caudal de acetileno: 1 - 1,5 u.a.
- Altura del mechero: 3 - 5 u.a.
- Anchura de rendija: 1,0 nm
- Intensidad de lámpara: 5,0 mA

7.2 Recta de calibrado

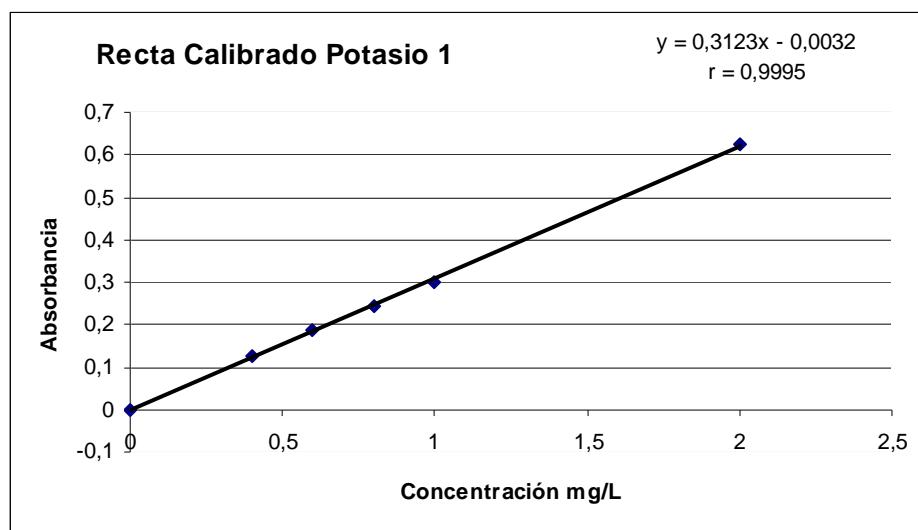
A partir de la solución patrón de potasio diluida (10 mg/L K), se preparan las siguientes soluciones:

- Blanco: (0,0 mg/L de K): 4mL HCl concentrado + 8 mL LaCl₃ (10%La) enrasada a 100 mL con agua desionizada.
- 0,4 mg/L de K: 2mL solución 10 mg/L de k + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 0,6 mg/L de K: 3mL solución 10 mg/L de k + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 0,8 mg/L de K: 4mL solución 10 mg/L de k + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 1,0 mg/L de K: 5mL solución 10 mg/L de k + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 2,0 mg/L de K: 10mL solución 10 mg/L de k + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)

Todas ellas menos el blanco, en matraces de 50 mL y enrasadas con agua desionizada

Concentración (mg/L)	0,0	0,4	0,6	0,8	1,0	2,0
Absorbancia	0,000	0,125	0,185	0,242	0,302	0,626
% RSD	4,7	0,4	3,0	0,4	3,7	1,8

Tabla 1. Datos recta de calibrado de potasio 1



3. Recta de calibrado de potasio 1

Con la ecuación de esta recta se calculan las concentraciones de las muestras.

7.3 Análisis de muestras

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L)
1	0,199	3,3	8,093
2	0,647	2,8	25,86
3	0,146	1,0	5,972
4	0,160	2,7	6,532
5	0,665	2,1	53,49
6	0,094	2,4	3,890
7	0,116	3,0	4,771
8	0,131	3,9	5,371
9	0,081	0,6	3,370
10	0,356	2,7	14,37
11	0,069	2,2	2,889
12	0,077	5,1	3,210
13	0,155	2,0	6,332
14	0,501	2,5	40,36
15	0,061	1,4	2,569
16	0,215	2,2	8,733
17	0,119	2,7	4,891
18	0,638	1,5	50,36

Tabla 2. Datos y concentraciones (considerada la dilución de las muestras) para el potasio

7.4 Límite de detección

Se calcula a partir de la desviación estándar del blanco y de la sensibilidad. Siendo:

$$\text{Límite de detección} = \frac{3 \cdot \text{Desviación estándar absoluta del blanco}}{\text{Sensibilidad}}$$

- Valores de absorbancia para el blanco:

-0,003; -0,003; -0,002; -0,002; -0,005; -0,005; -0,005; -0,001; 0,001; 0,002

$$\text{Desviación estándar absoluta} = 2,451 \cdot 10^{-3}$$

$$\text{Sensibilidad} = \text{Pendiente de la recta de calibrado} = 0,3123$$

$$\text{Límite de detección} = \frac{3 \cdot 2,451 \cdot 10^{-3}}{0,3123} = 2,354 \cdot 10^2 \text{ mg/L}$$

7.5 Estudio de Recuperación

Se preparan dos alícuotas iguales y a una de ellas se le adiciona una concentración conocida de potasio, en este caso 0,4 mg/L. Se quiere comprobar que la medida de las absorbancias indique realmente la presencia de 0,4 mg/L más.

Muestra 14

- M14: 1 mL muestra 1724 cristal
- M14 + 0,4 mg/L de K: 1 mL muestra 1724 cristal + 1 mL disolución de 10 mg/L de potasio

Ambas contienen también 1 mL de HCl (c), 2 mL de disolución LaCl₃ (10%) y agua desionizada hasta completar el matraz de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L K)
M14	0,501	2,5	1,614
M14+ 0,4 mg/L	0,633	1,3	2,037

Tabla 3: Datos recuperación muestra 1724 cristal (M14)

Las concentraciones de la tabla no tienen en cuenta la dilución de las muestras y han sido calculadas con la ecuación de la recta 1.

$$\% \text{ Recuperación: } \frac{2,037 - 1,614}{0,4} \bullet 100 = 105,6\%$$

Muestra 10

- *M10:* 1 mL muestra BO flowers cristal
- *M10 + 0,4 mg/L de K:* 1 mL muestra BO flowers cristal + 1 mL disolución de 10 mg/L de potasio

Ambas contienen además, 1 mL de HCl (c), 2 mL de disolución LaCl₃ (10%) y agua desionizada hasta completar el matraz de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L K)
M10	0,131	1,1	0,430
M10+ 0,4 mg/L	0,269	3,3	0,873

Tabla 4: Datos recuperación muestra BO flowers cristal (M10)

Las concentraciones de la tabla no tienen en cuenta la dilución de las muestras y han sido calculadas con la ecuación de la recta 1.

$$\% \text{ Recuperación: } \frac{0,873 - 0,430}{0,4} \bullet 100 = 110,6\%$$

7.6 Adición estándar

Se preparan una serie de alícuotas de la muestra, a las que se le añaden distintas cantidades estándar de potasio. Con esto podemos calcular la concentración de la muestra y así compararla con el valor obtenido anteriormente de la concentración resultante con la recta de calibrado.

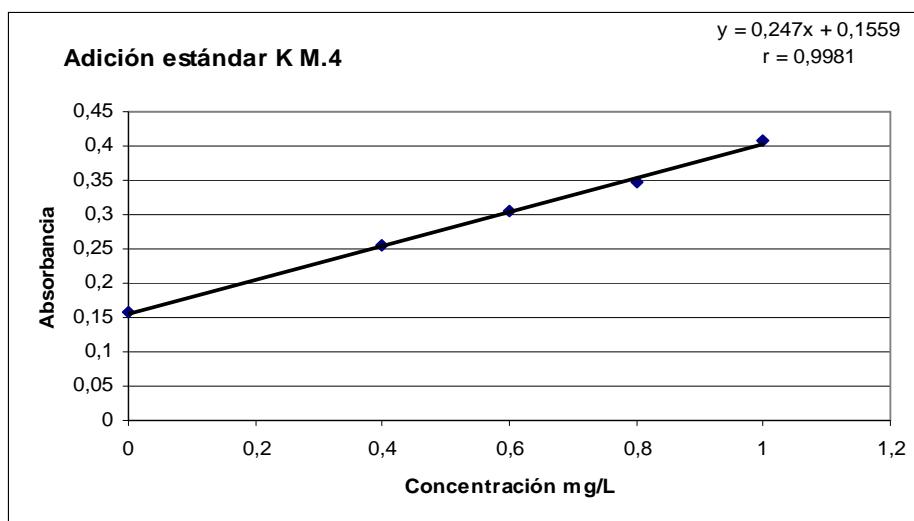
Muestra 4

- *Muestra 4:* 2 mL muestra + 1mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)
- *M4 +0,4 mg/L de K:* 2 mL muestra + 1 mL solución 10 mg/L de k + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)
- *M4 +0,6 mg/L de K:* 2 mL muestra + 1,5 mL solución 10 mg/L de k + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)
- *M4 +0,8 mg/L de K:* 2 mL muestra + 2 mL solución 10 mg/L de k + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)
- *M4 + 1 mg/L de K:* 2 mL muestra + 2,5 mL solución 10 mg/L de k + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)

Todos ellos enrasados con agua desionizada en matraces de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD
M4	0,157	0,9
M4 + 0,4 mg/L	0,255	2,1
M4 + 0,6 mg/L	0,304	0,2
M4 + 0,8 mg/L	0,347	1,6
M4 + 1 mg/L	0,408	2,5

Tabla 5: Datos adición estándar muestra Nordic lata (M4)



4. Adición estándar para M4 potasio

Se despeja la x de la ecuación de la recta obtenida para $y=0$, obteniéndose la concentración de la muestra 4.

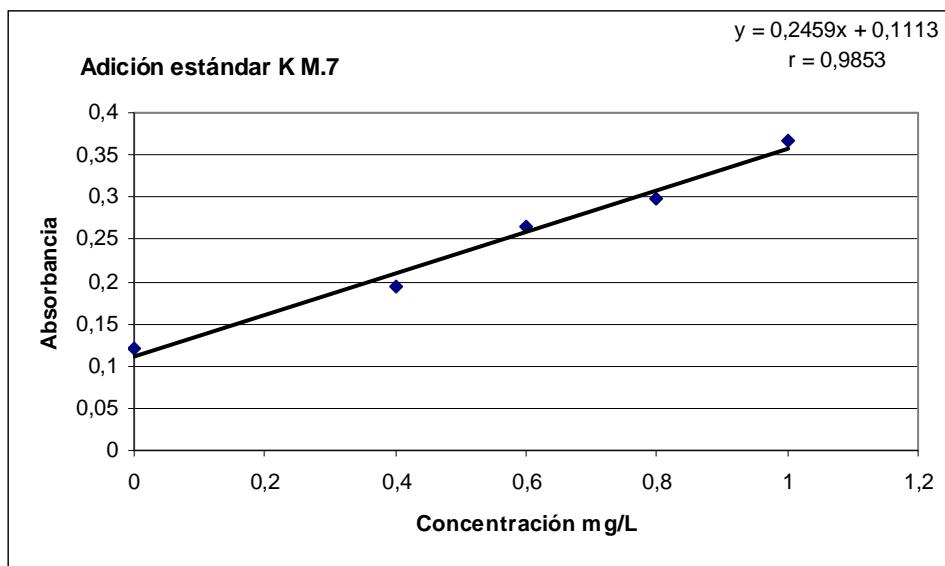
- Concentración Muestra 4 con recta de calibrado: 0,5225 mg/L de potasio
- Concentración Muestra 4 con adición estándar: 0,6311 mg/L de potasio

Muestra 7

- *Muestra 7:* 2 mL muestra + 1mL HCl (c) + 2 mL LaCl_3 (10%La)
- *$M7 + 0,4 \text{ mg/L de K}$:* 2 mL muestra + 1 mL solución 10 mg/L de k + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl_3 (10%La)
- *$M7 + 0,6 \text{ mg/L de K}$:* 2 mL muestra + 1,5 mL solución 10 mg/L de k + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl_3 (10%La)
- *$M7 + 0,8 \text{ mg/L de K}$:* 2 mL muestra + 2 mL solución 10 mg/L de k + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl_3 (10%La)
- *$M7 + 1 \text{ mg/L de K}$:* 2 mL muestra + 2,5 mL solución 10 mg/L de k + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl_3 (10%La)

Todos ellos enrasados con agua desionizada en matraces de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD
M7	0,120	4,3
M7 + 0,4 mg/L	0,195	2,1
M7 + 0,6 mg/L	0,264	2,5
M7 + 0,8 mg/L	0,298	2,1
M7 + 1 mg/L	0,368	2,1

Tabla 6: Datos adición estándar muestra Schweppes limón lata (M7)

5. Adición estándar para M7 potasio

Se despeja la x de la ecuación de la recta obtenida para $y=0$, obteniéndose la concentración de la muestra 7.

- Concentración Muestra 7 con recta de calibrado: 0,3816 mg/L de potasio
- Concentración Muestra 7 con adición estándar: 0,4526 mg/L de potasio

8. ESTUDIO DEL CONTENIDO EN MAGNESIO

8.1 Parámetros instrumentales

- $\lambda = 285,2 \text{ nm}$
- Caudal de aire: 6 - 7 u.a.
- Caudal de acetileno: 1 - 1,5 u.a.
- Altura del mechero: 4 - 6 u.a.
- Anchura de rendija: 0,5 nm
- Intensidad de lámpara: 4,0 mA

8.2 Recta de calibrado

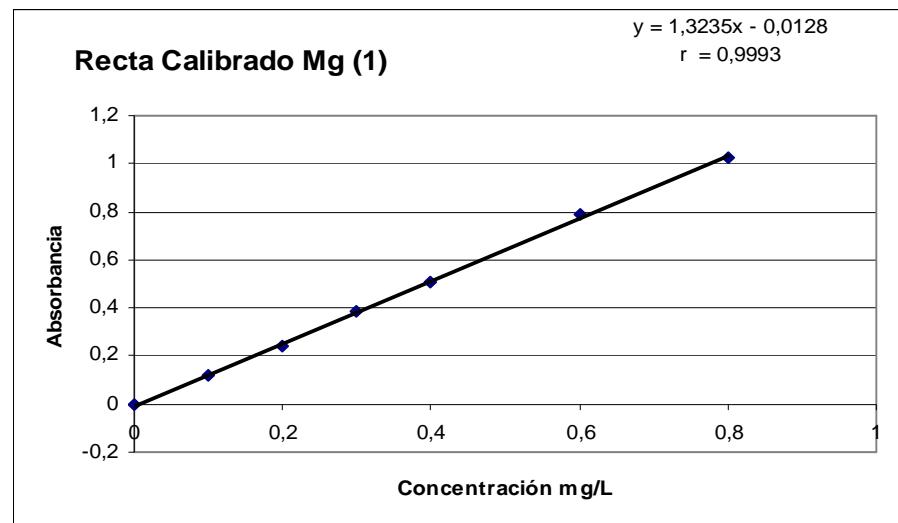
A partir de la solución patrón de magnesio diluida (10 mg/L Mg), se preparan las siguientes soluciones:

- Blanco: (0,0 mg/L de Mg): 4mL HCl concentrado + 8 mL LaCl₃ (10%La) enrasada a 100 mL con agua desionizada.
- 0,1 mg/L de Mg: 0,5mL solución 10 mg/L de Mg + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 0,2 mg/L de Mg: 1 mL solución 10 mg/L de Mg + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 0,3 mg/L de Mg: 1,5mL solución 10 mg/L de Mg + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 0,4 mg/L de Mg: 2 mL solución 10 mg/L de Mg + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 0,6 mg/L de Mg: 3 mL solución 10 mg/L de Mg + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)

Todas ellas menos el blanco, en matraces de 50 mL y enrasadas con agua desionizada

Concentración (mg/L)	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,6	0,8
Absorbancia	-0,004	0,119	0,243	0,384	0,508	0,790	1,027
% RSD	2,2	1,7	4,7	0,6	1,6	0,8	0,6

Tabla 7. Datos recta de calibrado de magnesio 1



6. Recta de calibrado de magnesio

Con la ecuación de esta recta se calculan las concentraciones de las muestras.

8.3 Análisis de muestras

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L)
1	0,170	2,5	1,726
2	0,183	0,9	1,849
3	0,093	3,8	0,999
4	0,424	3,3	4,125
5	0,225	3,2	2,245
6	0,397	3,4	3,870
7	0,202	5,0	2,028
8	0,384	4,6	3,747
9	0,121	3,8	1,263
10	0,990	2,4	9,471
11	0,050	2,5	0,593
12	0,578	5,0	5,579
13	0,497	1,4	4,814
14	0,016	13,2	0,272
15	0,097	5,1	1,037
16	0,224	2,7	22,36
17	0,491	3,7	4,758
18	0,657	1,0	6,326

Tabla 8. Datos y concentraciones (considerada la dilución de las muestras) para el magnesio

8.4 Límite de detección

Se calcula a partir de la desviación estándar del blanco y de la sensibilidad. Siendo:

$$\text{Límite de detección} = \frac{3 \cdot \text{Desviación estándar absoluta del blanco}}{\text{Sensibilidad}}$$

- Valores de absorbancia para el blanco:

-0,005; -0,004; -0,006; -0,004; -0,003; -0,001; -0,002; -0,003; -0,001; -0,001

Desviación estándar absoluta = $1,764 \cdot 10^{-3}$

Sensibilidad = Pendiente de la recta de calibrado = 1,3235

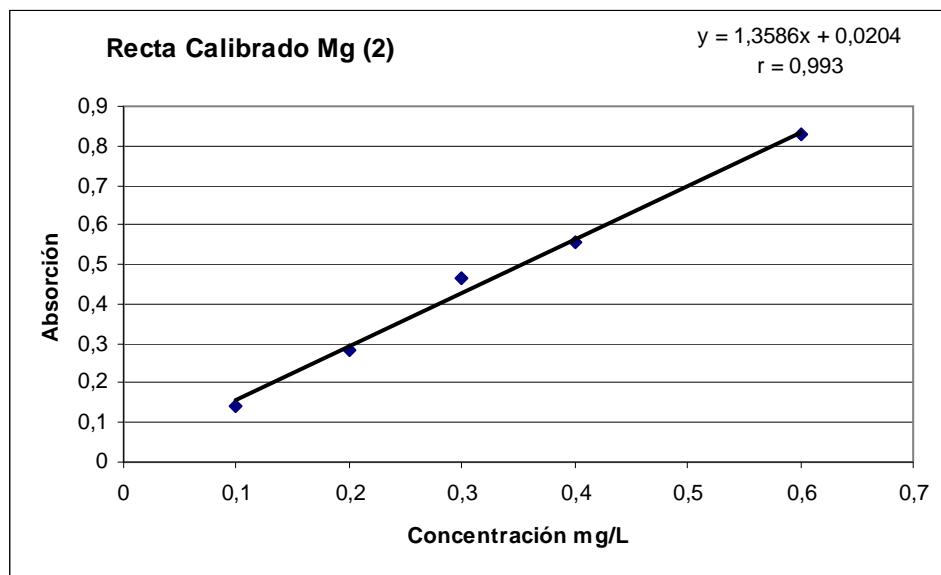
$$\text{Límite de detección} = \frac{3 \cdot 1,764 \cdot 10^{-3}}{1,3235} = 3,998 \cdot 10^{-3} \text{ mg/L}$$

8.5 Estudio de Recuperación

Se preparan dos alícuotas iguales y a una de ellas se le adiciona una concentración conocida de magnesio, en este caso 0,2 mg/L. Se quiere comprobar que la medida de las absorbancias indique realmente la presencia de 0,2 mg/L más.

Concentración (mg/L)	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,6
Absorbancia	-0,004	0,143	0,284	0,467	0,555	0,827
% RSD	2,3	0,7	2,7	1,4	0,8	0,4

Tabla 9. Datos recta de calibrado de magnesio 2



7. Recta de calibrado de magnesio 2

Con la ecuación de esta recta 2 se calculan las concentraciones de las recuperaciones.

Muestra 4

- $M4$: 2 mL muestra Nordic lata
- $M4 + 0,2 \text{ mg/L de Mg}$: 2 mL muestra Nordic lata + 0,5 mL disolución de 10 mg/L de magnesio

Ambas contienen también 1 mL de HCl (c), 2 mL de disolución LaCl_3 (10%) y agua desionizada hasta completar el matraz de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L Mg)
M4	0,445	3,9	0,312
M4+ 0,2 mg/L	0,717	4,6	0,512

Tabla 10: Datos recuperación muestra Nordic lata (M4)

Las concentraciones de la tabla no tienen en cuenta la dilución de las muestras y han sido calculadas con la ecuación de la recta 2.

% Recuperación:
$$\frac{0,512 - 0,312}{0,2} \bullet 100 = 100,1\%$$

Muestra 6

- *M6: 2 mL muestra Berta lata*
- *M6 + 0,2 mg/L de Mg: 2 mL muestra Berta lata + 0,5 mL disolución de 10 mg/L de magnesio*

Ambas contienen también 1 mL de HCl (c), 2 mL de disolución LaCl₃ (10%) y agua desionizada hasta completar el matraz de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L K)
M6	0,421	1,0	0,294
M6+ 0,2 mg/L	0,674	1,2	0,481

Tabla 11: Datos recuperación muestra Berta lata (M6)

Las concentraciones de la tabla no tienen en cuenta la dilución de las muestras y han sido calculadas con la ecuación de la recta 2.

$$\% \text{ Recuperación: } \frac{0,481 - 0,294}{0,2} \bullet 100 = 93,1\%$$

8.6 Adición estándar

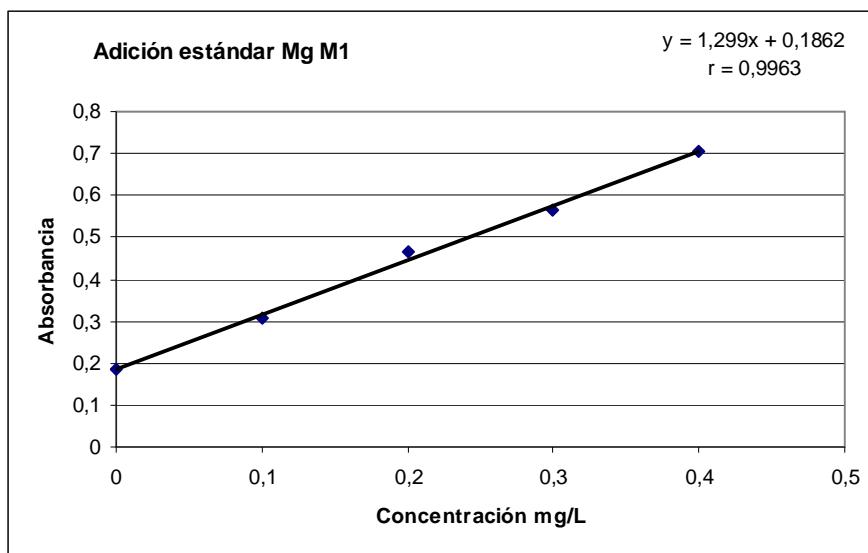
Se preparan una serie de alícuotas de la muestra, a las que se le añaden distintas cantidades estándar de magnesio. Con esto podemos calcular la concentración de la muestra y así compararla con el valor obtenido anteriormente de la concentración resultante con la recta de calibrado.

Muestra 1

- *Muestra 1: 2 mL muestra + 1mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M1 + 0,1 mg/L de Mg: 2 mL muestra + 0,25 mL solución 10 mg/L de Mg + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M1 + 0,2 mg/L de Mg: 2 mL muestra + 0,5 mL solución 10 mg/L de Mg + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M1 + 0,3 mg/L de Mg: 2 mL muestra + 0,75 mL solución 10 mg/L de Mg + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M1 + 0,4 mg/L de Mg: 2 mL muestra + 1 mL solución 10 mg/L de Mg + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*

Todos ellos enrasados con agua desionizada en matraces de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD
M1	0,157	0,9
M1 + 0,1 mg/L	0,255	2,1
M1 + 0,2 mg/L	0,304	0,2
M1 + 0,3 mg/L	0,347	1,6
M1 + 0,4 mg/L	0,408	2,5

Tabla 12: Datos adición estándar muestra Blue Kas lata (M1)**8. Adición estándar para M1 magnesio**

Se despeja la x de la ecuación de la recta obtenida para $y=0$, obteniéndose la concentración de la muestra 1.

- Concentración Muestra 1 con recta de calibrado: 0,1381 mg/L de magnesio
- Concentración Muestra 1 con adición estándar: 0,1433 mg/L de magnesio

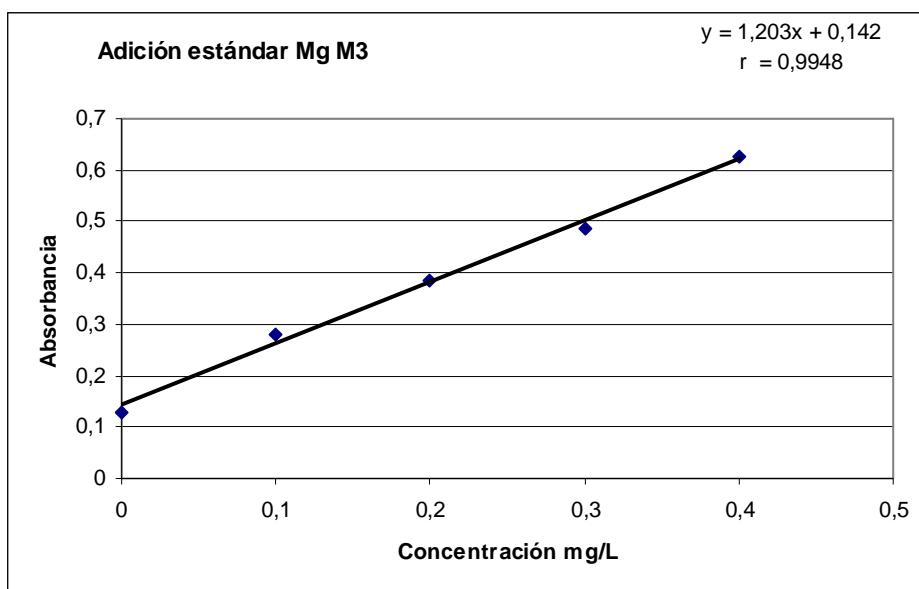
Muestra 3

- *Muestra 3: 2 mL muestra + 1mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M3 +0,1 mg/L de Mg: 2 mL muestra 0,25 mL solución 10 mg/L de Mg + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M3 +0,2 mg/L de Mg: 2 mL muestra 0,5 mL solución 10 mg/L de Mg + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M3 +0,3 mg/L de Mg: 2 mL muestra 0,75 mL solución 10 mg/L de Mg + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M3 + 0,4 mg/L de Mg: 2 mL muestra 1 mL solución 10 mg/L de Mg + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*

Todos ellos enrasados con agua desionizada en matraces de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD
M3	0,130	2,7
M3 + 0,1 mg/L	0,281	2,7
M3 + 0,2 mg/L	0,386	2,1
M3 + 0,3 mg/L	0,488	2,0
M3 + 0,4 mg/L	0,628	1,0

Tabla 13: Datos adición estándar muestra Schweppes lata (M3)



9. Adición estándar para M3 magnesio.

Se despeja la x de la ecuación de la recta obtenida para $y=0$, obteniéndose la concentración de la muestra 3.

- Concentración Muestra 3 con recta de calibrado: 0,0799 mg/L de magnesio
- Concentración Muestra 3 con adición estándar: 0,1180 mg/L de magnesio

9. ESTUDIO DEL CONTENIDO EN CALCIO

9.1 Parámetros instrumentales

- $\lambda = 422,7 \text{ nm}$
- Caudal de aire: 6 - 7 u.a.
- Caudal de acetileno: 1 - 1,5 u.a.
- Altura del mechero: 1 - 3 u.a.
- Anchura de rendija: 0,5 nm
- Intensidad de lámpara: 10 mA

9.2 Recta de calibrado

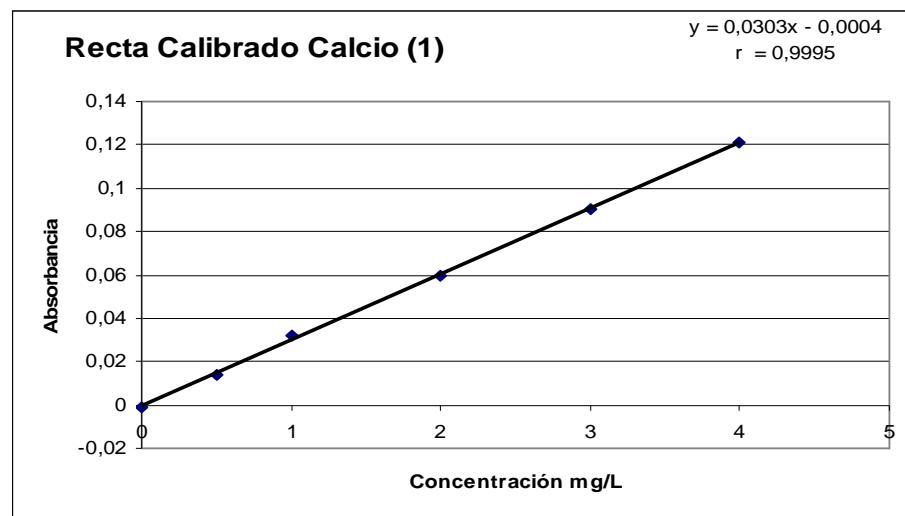
A partir de la solución patrón de calcio diluida (50 mg/L Ca), se preparan las siguientes soluciones:

- Blanco: (0,0 mg/L de Ca): 4mL HCl concentrado + 8 mL LaCl₃ (10%La) enrasada a 100 mL con agua desionizada.
- 0,5 mg/L de Ca: 0,5 mL solución 50 mg/L de Ca + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 1 mg/L de Ca: 1 mL solución 50 mg/L de Ca + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 2 mg/L de Ca: 2 mL solución 50 mg/L de Ca+ 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 3 mg/L de Ca: 3 mL solución 50 mg/L de Ca + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 4 mg/L de Ca: 4 mL solución 50 mg/L de Ca + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)

Todas ellas menos el blanco, en matraces de 50 mL y enrasadas con agua desionizada

Concentración (mg/L)	0,0	0,5	1,0	2,0	3,0	4,0
Absorbancia	-0,001	0,014	0,032	0,060	0,090	0,121
% RSD	7,0	10,5	5,1	5,1	4,3	0,5

Tabla 14: Datos recta de calibrado de calcio 1



10. Recta de calibrado de calcio 1

Con la ecuación de esta recta se calculan las concentraciones de las muestras.

9.3 Análisis de muestras

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L)
1	0,020	4,3	8,415
2	0,013	5,2	5,528
3	0,011	4,0	4,703
4	0,052	2,8	21,62
5	0,038	2,5	15,84
6	0,024	5,1	10,06
7	0,012	5,9	5,115
8	0,053	5,8	22,03
9	0,011	3,0	4,703
10	0,017	0,8	14,35
11	0,005	7,2	2,227
12	0,045	1,7	18,73
13	0,076	3,9	31,52
14	0,008	7,7	3,465
15	0,008	8,0	3,465
16	0,132	4,3	109,2
17	0,072	1,2	59,73
18	0,095	2,0	78,71

Tabla 15: Datos y concentraciones (considerada la dilución de las muestras) para el calcio

9.4 Límite de detección

Se calcula a partir de la desviación estándar del blanco y de la sensibilidad. Siendo:

$$\text{Límite de detección} = \frac{3 \cdot \text{Desviación estándar absoluta del blanco}}{\text{Sensibilidad}}$$

- Valores de absorbancia para el blanco:

-0,001; -0,001; -0,002; -0,002; -0,002; -0,002; -0,003; -0,003; -0,003

Desviación estándar absoluta = $6,666 \cdot 10^{-4}$

Sensibilidad = Pendiente de la recta de calibrado = 0,0303

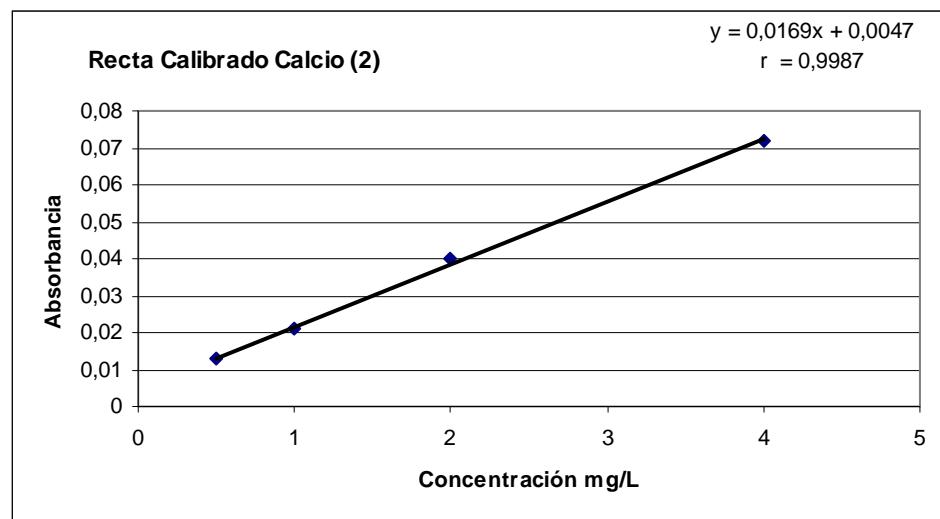
$$\text{Límite de detección} = \frac{3 \cdot 6,666 \cdot 10^{-4}}{0,0303} = 6,600 \cdot 10^2 \text{ mg/L}$$

9.5 Estudio de Recuperación

Se preparan dos alícuotas iguales y a una de ellas se le adiciona una concentración conocida de calcio, en este caso 1 mg/L. Se quiere comprobar que la medida de las absorbancias indique realmente la presencia de 1 mg/L más.

Concentración (mg/L)	0,5	1,0	2,0	4,0
Absorbancia	0,013	0,021	0,040	0,072
% RSD	2,2	0,7	2,7	1,4

Tabla 16: Datos recta de calibrado de calcio 2



11. Recta de calibrado de calcio 2

Con la ecuación de esta recta 2 se calculan las concentraciones de las recuperaciones.

Muestra 8

- *M8: 1 mL muestra Nordic plástico*
- *M8 + 1 mg/L de Ca: 1 mL muestra Nordic plástico + 0,5 mL disolución de 50 mg/L de calcio*

Ambas contienen también 1 mL de HCl (c), 2 mL de disolución LaCl₃ (10%) y agua desionizada hasta completar el matraz de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L Ca)
M8	0,017	8,8	0,828
M8+ 1 mg/L	0,037	2,7	1,893

Tabla 17: Datos recuperación muestra Nordic plástico (M8)

Las concentraciones de la tabla no tienen en cuenta la dilución de las muestras y han sido calculadas con la ecuación de la recta 2.

% Recuperación: $\frac{1,893 - 0,828}{1} \bullet 100 = 106,5\%$

Muestra 13

- *M13: 1 mL muestra Indi cristal*
- *M13 + 1 mg/L de Ca: 1 mL muestra Indi cristal + 0,5 mL disolución de 50 mg/L de calcio*

Ambas contienen además, 1 mL de HCl (c), 2 mL de disolución LaCl₃ (10%) y agua desionizada hasta completar el matraz de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L Ca)
M13	0,025	0,7	1,183
M13+ 1 mg/L	0,049	5,2	2,130

Tabla 18: Datos recuperación muestra Indi cristal (M13)

Las concentraciones de la tabla no tienen en cuenta la dilución de las muestras y han sido calculadas con la ecuación de la recta 2.

$$\% \text{ Recuperación: } \frac{2,130 - 1,183}{1} \bullet 100 = 94,67\%$$

9.6 Adición estándar

Se preparan una serie de alícuotas de la muestra, a las que se le añaden distintas cantidades estándar de calcio. Con esto podemos calcular la concentración de la muestra y así compararla con el valor obtenido anteriormente de la concentración resultante con la recta de calibrado.

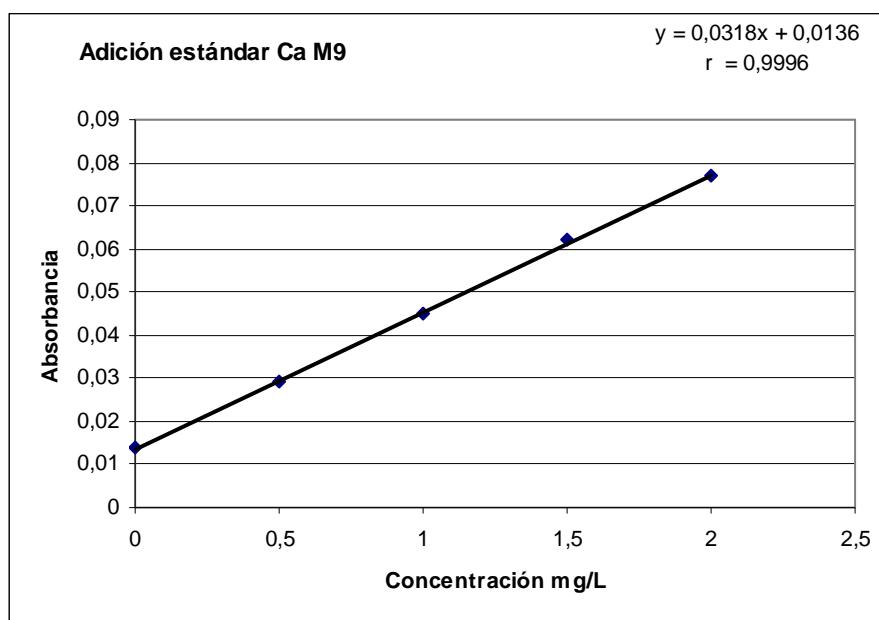
Muestra 9

- *Muestra 9: 2 mL muestra + 1mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M9 + 0,5 mg/L de Ca: 2 mL muestra + 0,25 mL solución 50 mg/L de Ca + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M9 + 1 mg/L de Ca: 2 mL muestra + 0,5 mL solución 50 mg/L de Ca + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M9 + 1,5 mg/L de Ca: 2 mL muestra + 0,75 mL solución 50 mg/L de Ca + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M9 + 2 mg/L de Ca: 2 mL muestra + 1 mL solución 50 mg/L de Ca+ 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*

Todos ellos enrasados con agua desionizada en matraces de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD
M9	0,014	0,9
M9 + 0,5 mg/L	0,029	1,5
M9 + 1 mg/L	0,045	2,1
M9 + 1,5 mg/L	0,062	0,3
M9 + 2 mg/L	0,077	1,8

Tabla 19: Datos adición estándar muestra Schweppes Premium cristal (M9)



12. Adición estándar para M9 calcio

Se despeja la x de la ecuación de la recta obtenida para $y=0$, obteniéndose la concentración de la muestra 9.

- Concentración Muestra 9 con recta de calibrado: 0,3762 mg/L de calcio
- Concentración Muestra 9 con adición estándar: 0,4276 mg/L de calcio

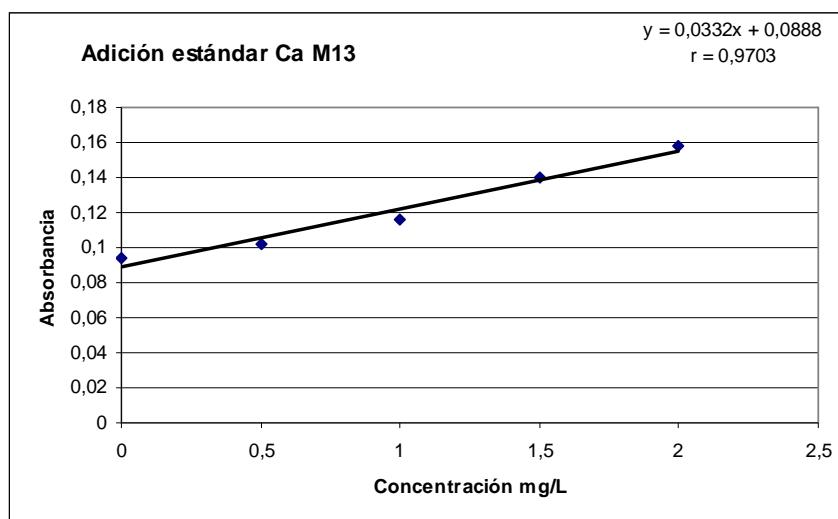
Muestra 13

- *Muestra 13:* 2 mL muestra + 1mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)
- *M13 + 0,5 mg/L de Ca:* 2 mL muestra +0,25 mL solución 50 mg/L de Ca + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)
- *M13 + 1 mg/L de Ca:* 2 mL muestra + 0,5 mL solución 50 mg/L de Ca + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)
- *M13 + 1,5 mg/L de Ca:* 2 mL muestra + 0,75 mL solución 50 mg/L de Ca + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)
- *M13 + 2 mg/L de Ca:* 2 mL muestra + 1 mL solución 50 mg/L de Ca+ 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)

Todos ellos enrasados con agua desionizada en matraces de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD
M13	0,094	2,1
M13 + 0,5 mg/L	0,102	3,6
M13 + 1 mg/L	0,116	1,3
M13 + 1,5 mg/L	0,140	0,7
M13 + 2 mg/L	0,158	2,0

Tabla 20: Datos adición estándar muestra Indi cristal (M13)



13. Adición estándar para M13 calcio.

Se despeja la x de la ecuación de la recta obtenida para y=0, obteniéndose la concentración de la muestra 13.

- Concentración Muestra 13 con recta de calibrado: 2,2514 mg/L de calcio
- Concentración Muestra 13 con adición estándar: 2,6746 mg/L de calcio

10. ESTUDIO DEL CONTENIDO EN SODIO

10.1 Parámetros instrumentales

- $\lambda = 589,6 \text{ nm}$
- Caudal de aire: 6 - 7 u.a.
- Caudal de acetileno: 1 - 1,5 u.a.
- Altura del mechero: 2 - 4 u.a.
- Anchura de rendija: 0,5 nm
- Intensidad de lámpara: 5,0 mA

10.2 Recta de calibrado

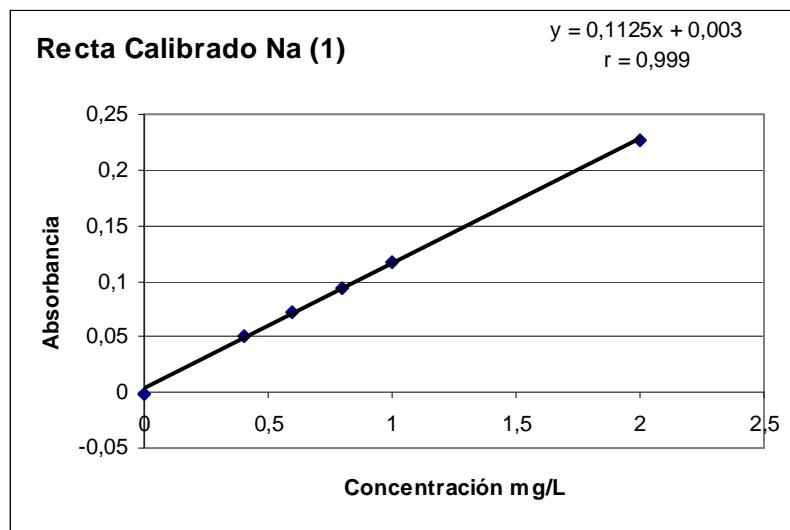
A partir de la solución patrón de calcio diluida (10 mg/L Na), se preparan las siguientes soluciones:

- Blanco: (0,0 mg/L de Ca): 4mL HCl concentrado + 8 mL LaCl₃ (10%La) enrasada a 100 mL con agua desionizada.
- 0,4 mg/L de Ca: 2mL solución 10 mg/L de Na + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 0,6 mg/L de Ca: 3 mL solución 10 mg/L de Na + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 0,8 mg/L de Ca: 4 mL solución 10 mg/L de Na+ 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 1 mg/L de Ca: 5 mL solución 10 mg/L de Na + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)
- 2 mg/L de Ca: 10 mL solución 10 mg/L de Na + 2 mL HCl (c) + 4 mL LaCl₃ (10%La)

Todas ellas menos el blanco, en matraces de 50 mL y enrasadas con agua desionizada.

Concentración (mg/L)	0,0	0,4	0,6	0,8	1,0	2,0
Absorbancia	-0,001	0,050	0,072	0,094	0,117	0,226
% RSD	77,7	0,6	0,8	1,0	1,0	0,4

Tabla 21: Datos recta de calibrado de sodio 1



14. Recta de calibrado de sodio 1

Con la ecuación de esta recta se calculan las concentraciones de las muestras.

10.3 Análisis de muestras

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg(L))
1	0,030	1,4	6,000
2	0,212	1,2	46,44
3	0,030	1,9	6,000
4	0,054	0,1	11,33
5	0,138	0,3	30,00
6	0,223	0,2	48,88
7	0,032	2,0	6,444
8	0,061	1,0	12,88
9	0,033	0,4	6,666
10	0,237	0,5	52,00
11	0,174	1,0	38,00
12	0,054	0,6	11,33
13	0,179	0,8	78,22
14	0,231	0,5	101,3
15	0,137	0,7	29,77
16	0,132	0,3	57,33
17	0,045	1,2	9,333
18	0,137	0,3	29,77

Tabla 22: Datos y concentraciones (considerada la dilución de las muestras) para el sodio

10.4 Límite de detección

Se calcula a partir de la desviación estándar del blanco y de la sensibilidad. Siendo:

$$\text{Límite de detección} = \frac{3 \cdot \text{Desviación estándar absoluta del blanco}}{\text{Sensibilidad}}$$

- Valores de absorbancia para el blanco:
-0,004; -0,004; -0,004; -0,004; -0,004; -0,004; -0,004; -0,004; -0,004; -0,004

$$\text{Desviación estándar absoluta} = 9,1428 \cdot 10^{-19}$$

$$\text{Sensibilidad} = \text{Pendiente de la recta de calibrado} = 0,0303$$

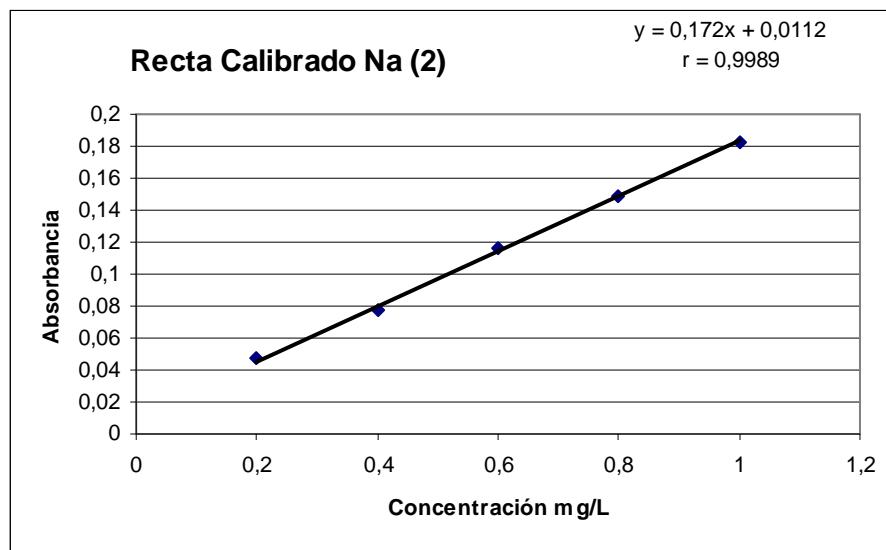
$$\text{Límite de detección} = \frac{3 \cdot 9,1428 \cdot 10^{-19}}{0,1125} = 2,43808 \cdot 10^{-17} \text{ mg/L}$$

10.5 Estudio de Recuperación

Se preparan dos alícuotas iguales y a una de ellas se le adiciona una concentración conocida de sodio, en este caso 0,4 mg/L. Se quiere comprobar que la medida de las absorbancias indique realmente la presencia de 0,4 mg/L más.

Concentración (mg/L)	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
Absorbancia	0,047	0,077	0,116	0,149	0,183
% RSD	2,7	2,0	2,3	1,0	1,4

Tabla 23: Datos recta de calibrado de sodio 2



15. Recta de calibrado de sodio 2

Con la ecuación de esta recta 2 se calculan las concentraciones de las recuperaciones.

Muestra 9

- M9: 1 mL muestra Schweppes Premium cristal
- M9 + 0,4 mg/L de Na: 1 mL muestra Schweppes Premium cristal + 1 mL disolución de 10 mg/L de sodio

Ambas contienen también 1 mL de HCl (c), 2 mL de disolución LaCl₃ (10%) y agua desionizada hasta completar el matraz de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L Na)
M9	0,032	1,0	0,122
M9+ 0,4 mg/L	0,129	2,0	1,120

Tabla 24: Datos recuperación muestra Schweppes Premium cristal (M9)

Las concentraciones de la tabla no tienen en cuenta la dilución de las muestras y han sido calculadas con la ecuación de la recta 2.

% Recuperación: $\frac{0,684 - 0,122}{0,4} \bullet 100 = 140,8\%$

Muestra 12

- *M12: 1 mL muestra Seagrams cristal*
- *M12 + 0,4 mg/L de Na: 1 mL muestra Seagrams cristal + 1 mL disolución de 10 mg/L de sodio*

Ambas contienen además, 1 mL de HCl (c), 2 mL de disolución LaCl₃ (10%) y agua desionizada hasta completar el matraz de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD	Concentración (mg/L Na)
M12	0,086	4,4	0,434
M12+ 0,4 mg/L	0,186	0,9	1,016

Tabla 25: Datos recuperación muestra Seagrams cristal (M12)

Las concentraciones de la tabla no tienen en cuenta la dilución de las muestras y han sido calculadas con la ecuación de la recta 2.

$$\% \text{ Recuperación: } \frac{1,016 - 0,434}{0,4} \bullet 100 = 145,3\%$$

10.6 Adición estándar

Se preparan una serie de alícuotas de la muestra, a las que se le añaden distintas cantidades estándar de sodio. Con esto podemos calcular la concentración de la muestra y así compararla con el valor obtenido anteriormente de la concentración resultante con la recta de calibrado.

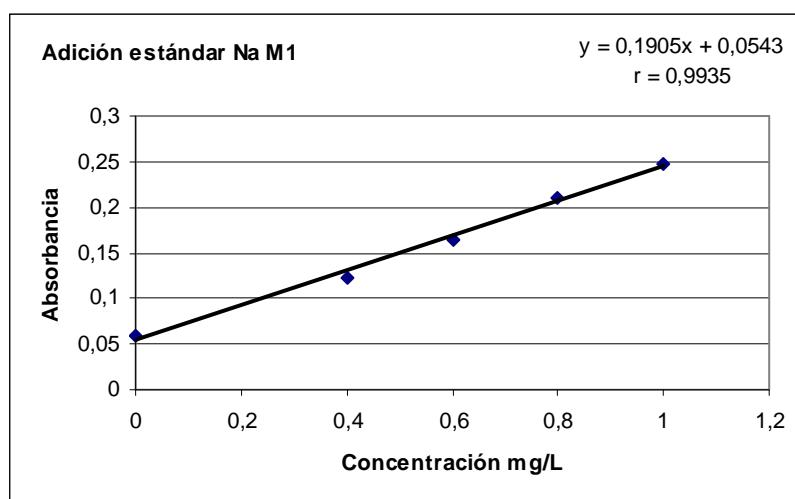
Muestra 1

- *Muestra 1: 1 mL muestra + 1mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M1 + 0,4 mg/L de Na: 1 mL muestra + 1 mL solución 10 mg/L de Na + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M1 + 0,6 mg/L de Na: 1 mL muestra + 1,5 mL solución 10 mg/L de Na + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M1 + 0,8 mg/L de Na: 1 mL muestra + 2 mL solución 10 mg/L de Na + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M1 + 1 mg/L de Na: 1 mL muestra + 2,5 mL solución 10 mg/L de Na + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*

Todos ellos enrasados con agua desionizada en matraces de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD
M1	0,060	1,4
M1 + 0,4 mg/L	0,122	2,3
M1 + 0,6 mg/L	0,165	1,5
M1 + 0,8 mg/L	0,211	2,5
M1 + 1 mg/L	0,247	3,3

Tabla 26: Datos adición estándar muestra Blue Kas lata (M1)



16. Adición estándar para M1 sodio

Se despeja la x de la ecuación de la recta obtenida para $y=0$, obteniéndose la concentración de la muestra 1.

- Concentración Muestra 1 con recta de calibrado: 0,2400 mg/L de calcio
- Concentración Muestra 1 con adición estándar: 0,2850mg/L de calcio

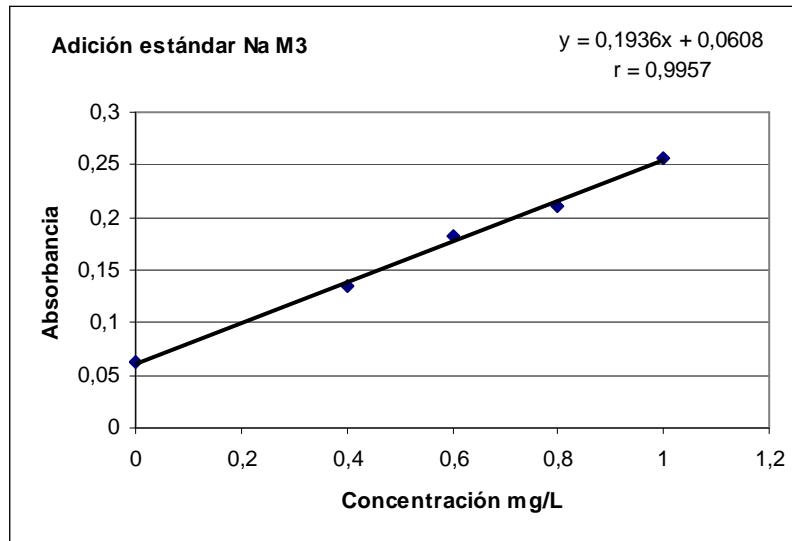
Muestra 3

- *Muestra 3: 1 mL muestra + 1mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M3 + 0,4 mg/L de Na: 1 mL muestra + 1 mL solución 10 mg/L de Na + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M3 + 0,6 mg/L de Na: 1 mL muestra + 1,5 mL solución 10 mg/L de Na + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)mg/L*
- *M3 + 0,8 mg/L de Na: 1 mL muestra + 2 mL solución 10 mg/L de Na + 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*
- *M3 + 1 mg/L de Na: 1 mL muestra + 2,5 mL solución 10 mg/L de Na+ 1 mL HCl (c) + 2 mL LaCl₃ (10%La)*

Todos ellos enrasados con agua desionizada en matraces de 25 mL.

Muestra	Absorbancia	%RSD
M3	0,060	1,4
M3 + 0,4 mg/L	0,122	2,3
M3 + 0,6 mg/L	0,165	1,5
M3 + 0,8 mg/L	0,211	2,5
M3 + 1 mg/L	0,247	3,3

Tabla 27: Datos adición estándar muestra Schweppes lata



17. Adición estándar para M3 sodio.

Se despeja la x de la ecuación de la recta obtenida para y=0, obteniéndose la concentración de la muestra 3.

- Concentración Muestra 3 con recta de calibrado: 0,2400 mg/L de sodio
- Concentración Muestra 3 con adición estándar: 0,3140 mg/L de sodio

11. CONCLUSIONES

11.1 Resumen de rectas de calibrado

Elemento	Nº de recta	Pendiente	Ordenada	Coeficiente correlación
Potasio	1	0,3123	-0,0032	0,9995
Magnesio	1	1,3235	-0,0128	0,9993
	2	1,3586	0,0204	0,9930
Calcio	1	0,0303	-0,0004	0,9995
	2	0,0169	0,0047	0,9987
Sodio	1	0,1125	0,0003	0,9990
	2	0,1720	0,0112	0,9989

Tabla 28: Resumen rectas de calibrado

11.2 Resumen estudios de recuperación

Elemento	Muestra	% Recuperación	Elemento	Muestra	% Recuperación
Potasio	M14	105,6	Calcio	M13	94,67
	M10	110,5		M8	106,5
Magnesio	M4	100,1	Sodio	M9	151,1
	M6	93,10		M12	145,3

Tabla 29: Resumen estudios de recuperación

El sodio tiene unos valores muy altos de recuperación, por lo que no sería conveniente medirlo por calibración externa a la vista de los resultados.

11.3 Resumen adiciones estándar

Elemento	Muestra	Concentración calibración externa	Concentración adición estándar	Error Relativo
Potasio	M4	0,5225	0,6312	17,2%
	M7	0,3816	0,4526	15,7%
Magnesio	M1	0,1381	0,1433	3,6%
	M3	0,0799	0,1180	32,2%
Calcio	M9	0,3762	0,4276	12,0%
	M13	2,521	2,674	4,71%
Sodio	M1	0,2400	0,2850	15,7%
	M3	0,2400	0,3140	23,6%

Tabla 30: Resumen adiciones estándar, concentraciones en mg/L (sin considerar dilución)

En todos los casos la concentración obtenida por adición estándar es mayor que la de calibración externa, siendo la diferencia más acusada en la muestra M3 (Schweppes lata) que se ha utilizado en Mg y Na.

Considerando que la concentración real es la obtenida por adición estándar, se ha calculado el error relativo al determinar la concentración por calibración externa en cada caso.

A la vista de los resultados, en calibración externa se presentan interferencias que inhiben la señal entre el 3 y el 17% excluyendo los valores de la M3.

11.4 Comparación concentraciones bibliográficas y experimentales

Se han encontrado valores bibliográficos sólo para aguas tónicas clásicas, que se comparan con los valores experimentales.

Datos	Aguas Tónicas	K	Mg	Ca	Na
Experimentales	Clásicas	3,890 – 53,49	0,999 – 4,125	4,703– 22,03	6,000 – 48,88
	Premium	2,569 – 40,36	0,272 – 5,579	2,227 – 31,52	6,666 - 101,3
	Light	25,86	1,849	5,528	46,44
	Limón	4,771 – 50,37	2,028 – 6,326	5,115 – 78,71	6,444 – 29,72
	Sabores	8,733 – 14,37	9,471 – 22,36	14,35 – 109,2	52,00 – 57,33
Bibliográficos [9]	Clásicas	-	-	-	90,00
Bibliográficos [10, 11]	Clásicas	0,0	0,0	30,00	30,00

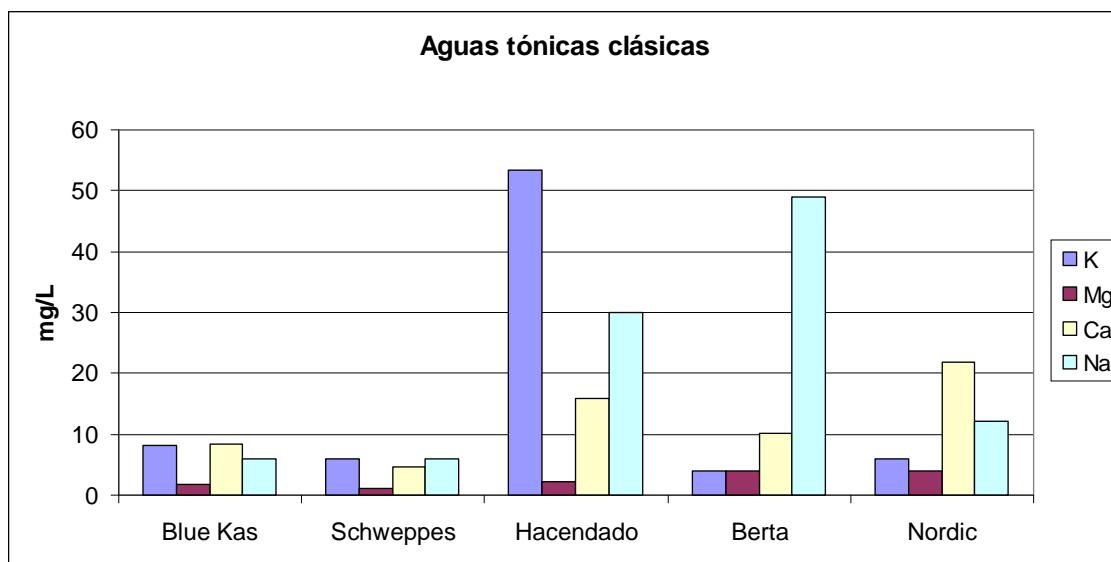
Tabla 31: Comparativa concentraciones bibliográficas y experimentales, en mg/L (considerando la dilución)

11.5 Concentraciones de elementos según el tipo de muestra

Se han clasificado las aguas tónicas de la siguiente manera:

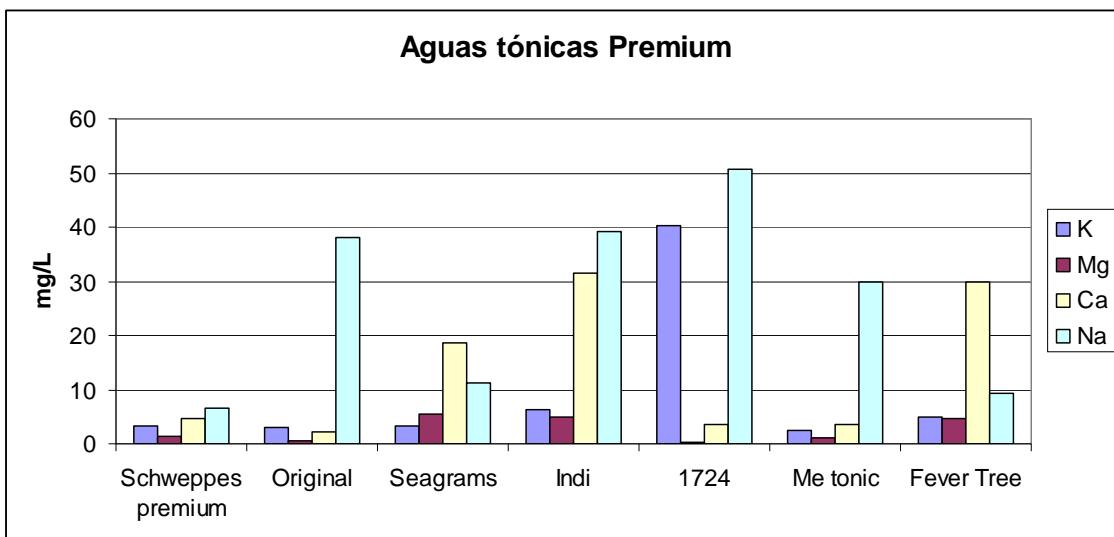
- Clásicas
- Premium
- Light
- Limón
- Otros sabores
- Por marca: Schweppes
- Por tipo de envase: Nordic en lata y en botella de plástico.

A continuación, tras la representación de cada gráfica, se comentan las excepciones y muestras con valores más altos para cada elemento.



18. Concentración de elementos en aguas tónicas clásicas

Como se puede observar en el gráfico, destaca la tónica Hacendado por su elevado contenido en potasio respecto de las demás muestras. También se puede destacar el contenido de sodio en la muestra de Berta, superior al de Hacendado. En cuanto a los valores de calcio, la muestra de Nordic tiene el más alto de las muestras comparadas. Respecto al magnesio se encuentran valores bajos en todas las muestras respecto de los otros elementos analizados.



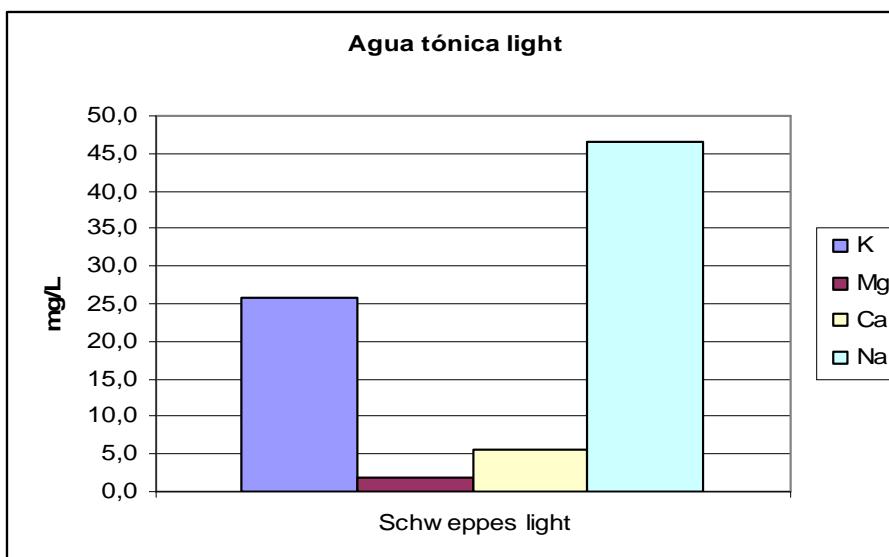
19. Concentración de elementos en aguas tónicas Premium

En cuanto a potasio, llama la atención la concentración obtenida en la muestra 1724, muy superior al resto. Ésta misma muestra contiene también el valor más alto de sodio, seguida por Indi y muy de cerca Original.

Respecto al calcio, se observa que la muestra Indi contiene su mayor valor, seguida por Fever Tree y Seagrams. El resto de muestras tiene un contenido de calcio muy inferior a las antes nombradas.

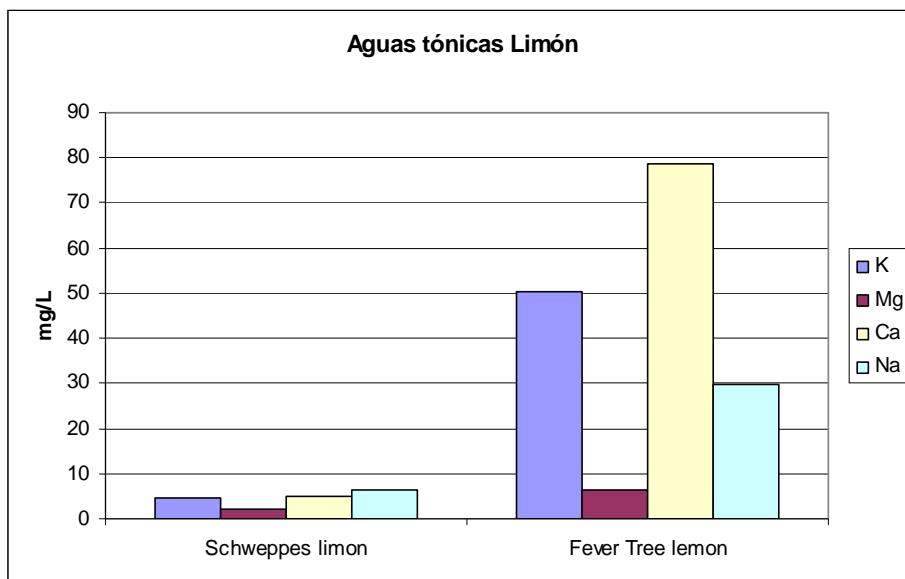
Para magnesio, encontramos valores pequeños respecto de los otros elementos.

Entre estas tónicas las diferencias de concentración sobre todo de calcio y sodio son mayores, debido a las diferencias de elaboración y por tanto de composición.



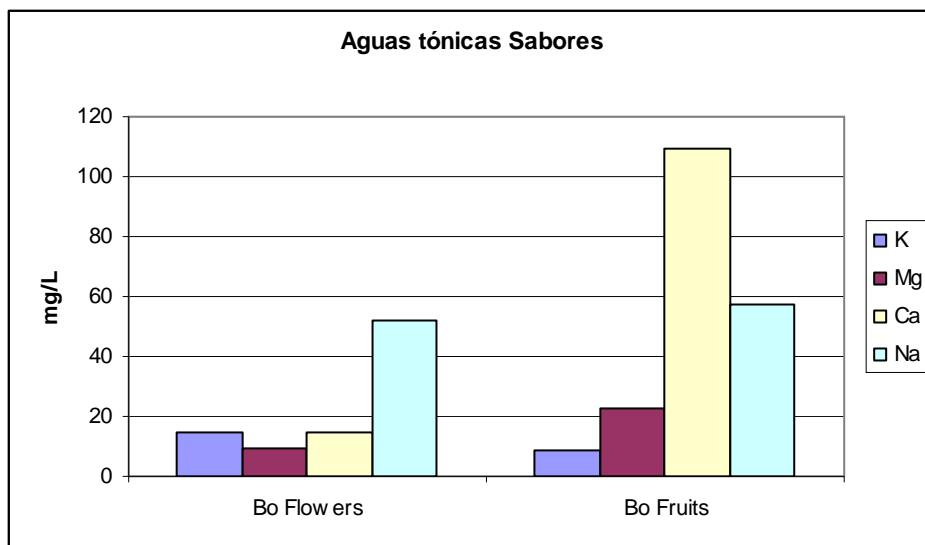
20. Concentración de elementos en agua tónica Light.

En cuanto a este tipo de tónica solo se dispone de una muestra, en la cual destaca el contenido en sodio, seguido del de potasio.



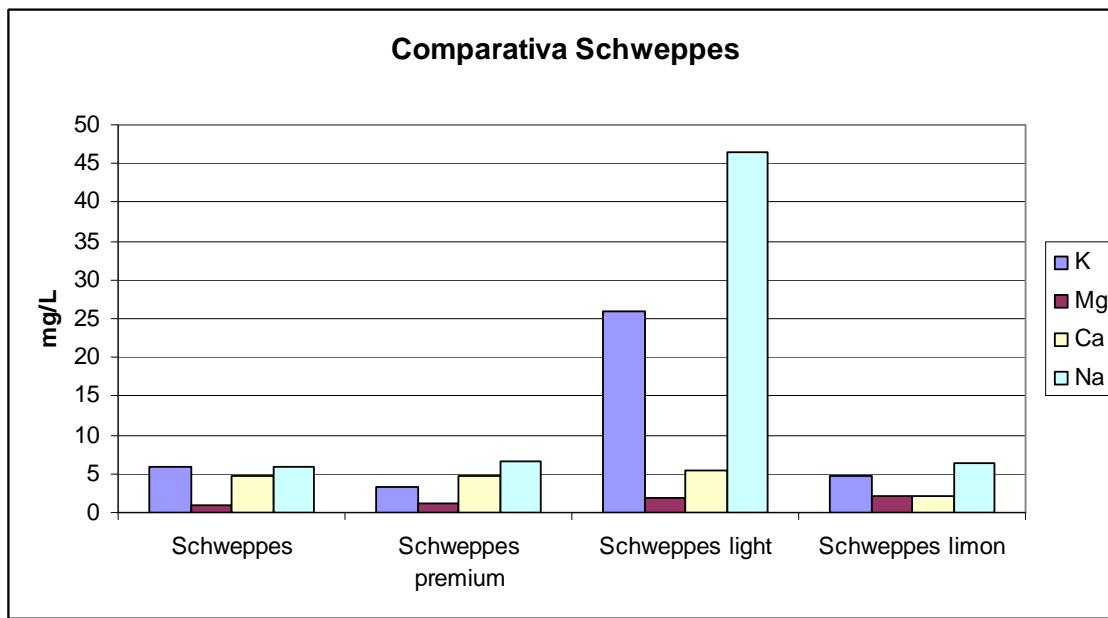
21. Concentración de elementos en aguas tónicas al limón

Cabe destacar el alto contenido en calcio que presenta la muestra Fever Tree lemon en comparación con Schweppes. Fever tree lemon también contiene un valor elevado de potasio y sodio. En las dos muestras se observan valores similares de magnesio para cada una de ellas siendo un poco superior en la muestra Fever Tree lemon.



22. Concentración de elementos en aguas tónicas sabores

Se observan valores parecidos de potasio y sodio en ambas muestras. En la muestra BO Fruits destaca el alto contenido en calcio respecto de la otra. En cuanto a magnesio, es superior en contenido en la muestra BO Fruits.



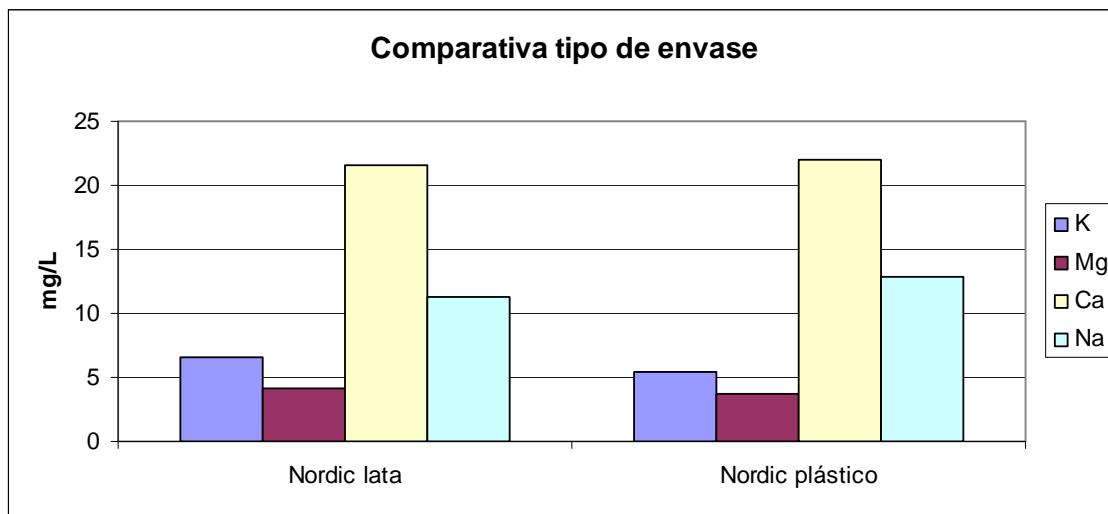
23. Concentración de elementos en aguas tónicas de la misma marca

Se observa una alta concentración de sodio y de potasio en la versión Light de la marca, respecto de las otras versiones.

En cuanto a las versiones Clásica, Premium y limón se puede ver un contenido similar tanto para sodio como para magnesio.

La versión Premium tiene un contenido inferior en potasio respecto de las demás.

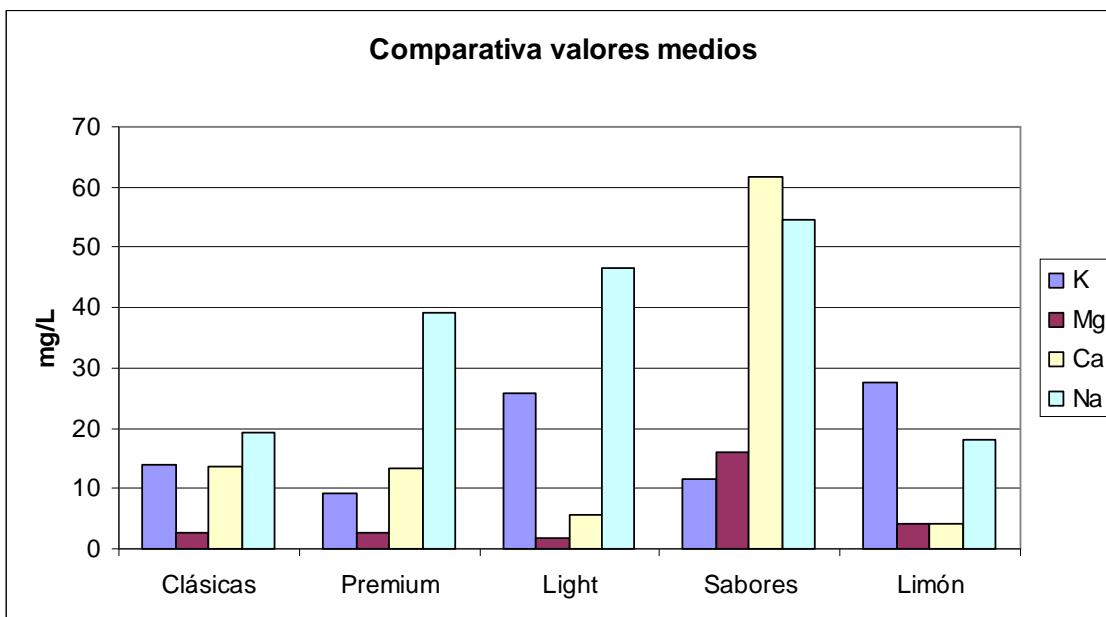
La versión limón es la que menor contenido en calcio presenta.



24. Concentración de elementos en aguas tónicas con distinto envase

Las diferencias no son significativas y tampoco se puede dar una conclusión con dos muestras.

11.6 Comparativa valores medios



25. Concentración media de elementos en aguas tónicas según clasificación

Las diferencias más notables se encuentran en la Light y las de sabores, teniendo éstas el mayor contenido en magnesio, calcio y sodio.

Para el sodio, el orden es el siguiente: Limón < Clásicas < Premium < Light < Sabores

Para el magnesio: Light < Premium < Clásicas < Limón < Sabores

Para el calcio: Limón < Light < Premium < Clásicas < Sabores

Cabe destacar que el calcio en las de sabores es más alto que en el resto, pero teniendo en cuenta que las concentraciones de las dos muestras estudiadas son muy diferentes entre si y lo que aparece en la gráfica es el valor medio (15- 110).

Para el potasio el orden es Premium < Sabores < Clásicas < Light < Limón

Las diferencias entre las Clásicas y las Premium estaría fundamentalmente en el mayor contenido de sodio y menor de potasio de éstas últimas.

12. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Wikipedia: aguas tónicas (1/07/2014)
- [2] Nutrición clínica y dietética Hospitalaria. Aspectos toxicológicos del consumo de bebidas refrescantes que contienen quinina. PDF (15/10/2013)
- [3] BELITZ, H.D.; GROSCH; W. *Química de los alimentos.* 2^a Ed. Zaragoza: Editorial Acribia, 1988. ISBN 9788420008356.
- [4] DOROSZ, P. *Tabla de vitaminas, sales minerales, oligoelementos.* Barcelona: Editorial Hispano Europea, 1996. ISBN 9788425513558
- [5] Schweppes España. . www.schweppes.es [ref. de 11/8/2014]
- [6] Ginebras.net, www.ginebras.net/tipo/tonicas [ref. de 11/8/2014]
- [7] Verema.com, www.verema.com [ref. de 11/8/2014]
- [8] PEÑA GARCÍA, Eva Luna, 2013. Determinación de elementos mayoritarios en refrescos de cola. Angélica Fernández (dir.). Proyecto Fin de Carrera. Universidad de Zaragoza.
- [9] Minerales de la tónica. (2/7/2014)
<http://cocacoladeargentina.com.ar/producto/schweppes-agua-tonica/>
- [10] Minerales de la tónica. (1/07/2014) <http://alimentos.org/minerales-tonica>
- [11] Tablas de nutrición [en línea]. Sociedad Española de Hipertensión - Liga Española para la lucha contra la hipertensión arterial [ref. de 2/07/2014].
www.seh-lelha.org/busalimento.aspx/

13. ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Datos recta de calibrado de potasio 1.....	13
Tabla 2. Datos y concentraciones (considerada la dilución de las muestras) para potasio.....	14
Tabla 3. Datos recuperación muestra 1724 cristal (M14).....	15
Tabla 4. Datos recuperación muestra BO fruits cristal (M10).....	16
Tabla 5. Datos adición estándar muestra Nordic lata (M4).....	17
Tabla 6. Datos adición estándar muestra Schweppes limón lata (M7).....	18
Tabla 7. Datos recta de calibrado de magnesio 1.....	19
Tabla 8. Datos y concentraciones (considerada la dilución de las muestras) para magnesio...20	20
Tabla 9. Datos recta de calibrado de magnesio 2.....	21
Tabla 10. Datos recuperación muestra Nordic lata (M4).....	22
Tabla 11. Datos recuperación muestra Berta lata (M6).....	23
Tabla 12. Datos adición estándar muestra Blue Kas lata (M1).....	24
Tabla 13. Datos adición estándar muestra Schweppes lata (M3).....	25
Tabla 14. Datos recta de calibrado de calcio 1.....	26
Tabla 15. Datos y concentraciones (considerada la dilución de las muestras) para calcio.....27	27
Tabla 16. Datos recta de calibrado de calcio 2.....	28
Tabla 17. Datos recuperación muestra Nordic plástico (M8).....	29
Tabla 18. Datos recuperación muestra Indi cristal (M13).....	30
Tabla 19. Datos adición estándar muestra Schweppes Premium cristal (M9)	31
Tabla 20. Datos adición estándar muestra Indi cristal (M13).....	32
Tabla 21. Datos recta de calibrado de sodio 1 con $\lambda= 589,6$ nm.....	33
Tabla 22. Datos y concentraciones (considerada la dilución de las muestras) para sodio.....34	34
Tabla 23. Datos recta de calibrado de sodio 2.....	35
Tabla 24. Datos recuperación muestra Schweppes Premium cristal (M9).....	36
Tabla 25. Datos recuperación muestra Seagrams cristal (M12).....	37
Tabla 26. Datos adición estándar muestra Blue Kas lata (M1).....	38
Tabla 27. Datos adición estándar muestra Schweppes lata.....	39
Tabla 28. Resumen rectas de calibrado.....	40
Tabla 29. Resumen estudios de recuperación.....	40

Tabla 30. Resumen adiciones estándar, concentraciones en mg/L (sin considerar dilución)....	41
Tabla 31. Comparativa concentraciones bibliográficas y experimentales, en mg/L (considerando la dilución)	42

14. ÍNDICE DE FIGURAS

1. Espectrómetro de absorción y emisión atómica de llama (Agilent Technologies).....	7
2.1 Blue Tonic Kas lata (M1).....	9
2.2 Schweppes Light lata (M2).....	9
2.3 Schweppes lata (M3).....	9
2.4 Nordic lata (M4).....	9
2.5 Hacendado tónica lata (M5).....	9
2.6 Berta tónica lata (M6).....	9
2.7 Schweppes Limón Lata (M7).....	9
2.8 Nordic botella plástico (M8).....	9
2.9 Schweppes Original Premium cristal (M9).....	9
2.10 BO Tonic water flowers cristal (M10)	9
2.11 Original cristal (M11).....	9
2.12 Seagrams cristal (M12).....	9
2.13 INDI cristal (M13).....	10
2.14 1724 cristal (M14)	10
2.15 ME tonic cristal (M15).....	10
2.16 BO tonic water fruits Cristal (M16).....	10
2.17 Fever-Tree cristal (M17).....	10
2.18 Fever-Tree lemon cristal (M18).....	10
3. Recta de calibrado de potasio 1.....	14
4. Adición estándar para M4 potasio.....	17
5. Adición estándar para M7 potasio	18
6. Recta de calibrado de magnesio.....	20
7. Recta de calibrado de magnesio 2.....	22
8. Adición estándar para M1 magnesio	24
9. Adición estándar para M3 magnesio.....	25
10. Recta de calibrado de calcio 1.....	27
11. Recta de calibrado de calcio 2.....	29

12. Adición estándar para M9 calcio	31
13. Adición estándar para M13 calcio.....	32
14. Recta de calibrado de sodio 1.....	34
15. Recta de calibrado de sodio 2	36
16. Adición estándar para M1 sodio	38
17. Adición estándar para M3 sodio.....	39
18. Concentración de elementos en aguas tónicas normales.....	43
19. Concentración de elementos en aguas tónicas premium	44
20. Concentración de elementos en agua tónica Light.....	44
21. Concentración de elementos en aguas tónicas al limón.....	45
22. Concentración de elementos en aguas tónicas sabores.....	45
23. Concentración de elementos en aguas tónicas de la misma marca.....	46
24. Concentración de elementos en aguas tónicas con distinto envase.....	46
25. Concentración media de elementos en aguas tónicas según clasificación.....	47