



UNIVERSIDAD  
**AUTÓNOMA**  
DE QUERÉTARO

**F1** | **FACULTAD**  
DE INGENIERÍA

# **Universidad Autónoma de Querétaro**

## **Facultad de Ingeniería**

Título del proyecto de Tesis:

**Estudio de CO<sub>2</sub> en agua: relación de luz láser y temperatura**

## **Tesis**

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de

**Licenciatura en Ingeniería Física**

Presenta

**Rodolfo Reyes Saavedra**

Dirigido por:

Dr. Domínguez Juárez Jorge Luis

Querétaro, Qro. A 5 de Marzo del 2026

La presente obra está bajo la licencia:  
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.es>



CC BY-NC-ND 4.0 DEED

Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional

### Usted es libre de:

**Compartir** — copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato

La licenciante no puede revocar estas libertades en tanto usted siga los términos de la licencia

### Bajo los siguientes términos:



**Atribución** — Usted debe dar [crédito de manera adecuada](#), brindar un enlace a la licencia, e [indicar si se han realizado cambios](#). Puede hacerlo en cualquier forma razonable, pero no de forma tal que sugiera que usted o su uso tienen el apoyo de la licenciante.



**NoComercial** — Usted no puede hacer uso del material con [propósitos comerciales](#).



**SinDerivadas** — Si [remezcla, transforma o crea a partir](#) del material, no podrá distribuir el material modificado.

**No hay restricciones adicionales** — No puede aplicar términos legales ni [medidas tecnológicas](#) que restrinjan legalmente a otras a hacer cualquier uso permitido por la licencia.

### Avisos:

No tiene que cumplir con la licencia para elementos del material en el dominio público o cuando su uso esté permitido por una [excepción o limitación](#) aplicable.

No se dan garantías. La licencia podría no darle todos los permisos que necesita para el uso que tenga previsto. Por ejemplo, otros derechos como [publicidad, privacidad, o derechos morales](#) pueden limitar la forma en que utilice el material.



# Universidad Autónoma de Querétaro

## Facultad de Ingeniería

Título del proyecto de Tesis:

**Estudio de CO<sub>2</sub> en agua: relación de luz láser y temperatura**

### **Tesis**

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de

**Licenciatura en Ingeniería Física**

Presenta

**Rodolfo Reyes Saavedra**

Dirigido por

**Dr. Domínguez Juárez Jorge Luis**

Dr. Domínguez Juárez Jorge Luis  
Presidente

\_\_\_\_\_.

Dra. Gómez Herrera María Lucero  
Vocal

\_\_\_\_\_.

Dr. Hernández Almada Alberto  
Secretario

\_\_\_\_\_.

Dr. Nava Mendoza Rufino  
Suplente

\_\_\_\_\_.

Querétaro, Qro. México 2026



## **Dedicatoria**

A mi madre, a mi padre, a mis hermanos y a mi abuela Malena,  
a quienes aprecio inmensamente y que han estado presentes  
para asegurarse de que cumpla mis metas.



## Agradecimientos

Agradezco a mi madre, padre y hermanos, quienes han estado presentes en momentos desafiantes y representan un pilar en mi vida, sin su apoyo constante, este trabajo no se hubiera completado. Quiero agradecer también a mi abuelita Malena por las múltiples ocasiones en que me esperó mientras salía del laboratorio del CFATA, siempre con mucho cariño y paciencia.

También quisiera expresar mi gratitud al Dr. Jorge Luis Domínguez por proveerme del conocimiento y las herramientas que necesitaba, particularmente por su gran pasión por la investigación, su guía, apoyo y el tiempo dedicado a completar este trabajo de tesis. Al grupo de trabajo del laboratorio de óptica y fotónica del CFATA, por la retroalimentación y por sus observaciones en las reuniones de grupo.

A mis profesores de la carrera, les agradezco inmensamente por compartir su tiempo y conocimiento conmigo, sus clases siempre fueron enriquecedoras en el ámbito académico y personal. A mis compañeros de la carrera, quienes ahora llamo amigos, les agradezco porque su aportación a mi vida se ha extendido incluso fuera de las aulas en las cuales convivimos y aprendimos juntos.

Finalmente, agradezco a la Universidad Autónoma de Querétaro y a la Facultad de Ingeniería por hacer todo esto posible, bajo los valores y principios que definen a esta casa de estudios he podido lograr mis metas y continuar mi crecimiento académico, profesional y personal.

# Índice de contenidos

|                                                                                          |           |
|------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1. INTRODUCCIÓN .....</b>                                                             | <b>12</b> |
| <b>2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA .....</b>                                               | <b>14</b> |
| <b>3. JUSTIFICACIÓN.....</b>                                                             | <b>15</b> |
| <b>4. ANTECEDENTES.....</b>                                                              | <b>16</b> |
| <b>5. HIPÓTESIS.....</b>                                                                 | <b>17</b> |
| 5.1. Hipótesis general .....                                                             | 17        |
| 5.2. Hipótesis específica.....                                                           | 17        |
| <b>6. OBJETIVOS.....</b>                                                                 | <b>18</b> |
| 6.1. Objetivo general .....                                                              | 18        |
| 6.2. Objetivos particulares.....                                                         | 18        |
| <b>7. MARCO TEÓRICO .....</b>                                                            | <b>19</b> |
| 7.1. Química del CO <sub>2</sub> en agua.....                                            | 19        |
| 7.1.1. Propiedades químicas del CO <sub>2</sub> .....                                    | 19        |
| 7.1.2. Reacciones del CO <sub>2</sub> en agua.....                                       | 19        |
| 7.2. Procesos de absorción de CO <sub>2</sub> .....                                      | 20        |
| 7.2.1. Absorción física y química de CO <sub>2</sub> en agua.....                        | 20        |
| 7.2.2. Ley de Henry .....                                                                | 20        |
| 7.2.3. Tasa de transferencia de masa .....                                               | 21        |
| 7.2.4. Métodos de absorción de CO <sub>2</sub> en agua.....                              | 21        |
| 7.3. Factores que influyen en la absorción de CO <sub>2</sub> .....                      | 22        |
| 7.3.1. Temperatura y presión .....                                                       | 22        |
| 7.3.2. Efecto del pH en la absorción de CO <sub>2</sub> .....                            | 22        |
| 7.3.3. Concentración de CO <sub>2</sub> en el gas de entrada .....                       | 22        |
| 7.3.4. Agitación y mezcla.....                                                           | 23        |
| 7.3.5. Otros factores .....                                                              | 23        |
| 7.4. Espectros de absorción y mezcla CO <sub>2</sub> y H <sub>2</sub> O.....             | 23        |
| 7.4.1. Espectro de absorción del CO <sub>2</sub> .....                                   | 24        |
| 7.4.2. Espectro de absorción del H <sub>2</sub> O.....                                   | 25        |
| 7.4.3. Cambio de temperatura debido al cambio de concentración del CO <sub>2</sub> ..... | 25        |



|                                                                                                |           |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>7.5. Análisis de muestras mediante herramientas ópticas .....</b>                           | <b>25</b> |
| 7.5.1. Lente térmica .....                                                                     | 25        |
| 7.5.2. Relación entre temperatura e índice de refracción.....                                  | 26        |
| 7.5.3. Espectroscopía de lente térmica .....                                                   | 26        |
| <b>7.6. Fotosíntesis artificial y sus aplicaciones.....</b>                                    | <b>27</b> |
| 7.6.1. Aplicaciones.....                                                                       | 27        |
| <b>8. METODOLOGÍA.....</b>                                                                     | <b>28</b> |
| <b>8.1. Preparación de muestras. Inyección de CO<sub>2</sub> en agua y medición de pH.....</b> | <b>28</b> |
| 8.1.1. Análisis del efecto del CO <sub>2</sub> en el pH .....                                  | 28        |
| 8.1.2. Valores de pH con y sin agitado .....                                                   | 29        |
| <b>8.2. Cálculo de concentración de CO<sub>2</sub> con base en el pH de la muestra .....</b>   | <b>29</b> |
| <b>8.3. Primeras mediciones en mesa óptica .....</b>                                           | <b>30</b> |
| 8.3.1. Preparación de muestras .....                                                           | 30        |
| 8.3.2. Generación de patrones de interferencia.....                                            | 30        |
| 8.3.3. Captura de patrones de difracción .....                                                 | 32        |
| <b>8.4. Análisis computacional.....</b>                                                        | <b>33</b> |
| 8.4.1. Repositorio para el análisis de patrones de difracción .....                            | 33        |
| 8.4.2. Análisis de áreas luminosas.....                                                        | 33        |
| 8.4.3. Ajuste de función Bessel orden cero.....                                                | 34        |
| <b>8.5. Análisis de error.....</b>                                                             | <b>35</b> |
| <b>8.6. Cálculo de concentraciones en función del valor de pCO<sub>2</sub> medido.....</b>     | <b>36</b> |
| <b>8.7. Instrumentación de la máquina de inyección CARBOMED.....</b>                           | <b>36</b> |
| <b>9. RECURSOS .....</b>                                                                       | <b>38</b> |
| <b>10. ALCANCE DEL PROYECTO .....</b>                                                          | <b>40</b> |
| <b>11. RESULTADOS .....</b>                                                                    | <b>41</b> |
| <b>11.1. Análisis de los efectos de disolución de CO<sub>2</sub> en agua .....</b>             | <b>41</b> |
| 11.1.1. Comparación de mezclas con y sin agitador magnético.....                               | 41        |
| 11.1.2. Estudio de escape de CO <sub>2</sub> disuelto en H <sub>2</sub> O.....                 | 43        |
| <b>11.2. Cálculo de concentración de CO<sub>2</sub> con base en el pH de la muestra .....</b>  | <b>44</b> |
| <b>11.3. Generación de patrones de difracción y preprocesamiento de imágenes .....</b>         | <b>46</b> |
| 11.3.1. Inyección de CO <sub>2</sub> y obtención de patrones de difracción .....               | 46        |
| 11.3.2. Preprocesamiento de Imágenes .....                                                     | 46        |



|                                                                                                                  |           |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>11.4. Análisis de áreas luminosas.....</b>                                                                    | <b>51</b> |
| <b>11.5. Ajuste de modelo matemático a perfiles de intensidad luminosa.....</b>                                  | <b>53</b> |
| 11.5.1. Selección de modelo para ajuste de perfiles de intensidad.....                                           | 53        |
| <b>11.6. Consideración de la presión parcial de CO<sub>2</sub>.....</b>                                          | <b>59</b> |
| 11.6.1. Presión teórica contra presión experimental .....                                                        | 59        |
| <b>11.7. Determinación de concentraciones del sistema carbonato mediante pCO<sub>2</sub> .....</b>               | <b>63</b> |
| 11.7.1. Cálculo teórico de disolución con ley de Henry .....                                                     | 63        |
| 11.7.2. Ecuaciones químicas relacionadas al proceso de disociación del ácido carbónico .....                     | 63        |
| 11.7.3. Desarrollo de fórmulas para el cálculo de concentración de compuestos .....                              | 64        |
| 11.7.4. Desarrollo de fórmulas para el cálculo de concentración de compuestos .....                              | 65        |
| <b>11.8. Ajuste de Bessel a los perfiles de intensidad incorporando la concentración molar de CO<sub>2</sub></b> | <b>68</b> |
| <b>12. TRABAJOS FUTUROS.....</b>                                                                                 | <b>69</b> |
| <b>13. CONCLUSIONES .....</b>                                                                                    | <b>70</b> |
| <b>14. BIBLIOGRAFÍA .....</b>                                                                                    | <b>72</b> |
| <b>15. ANEXOS .....</b>                                                                                          | <b>77</b> |
| 15.1. Estudio adicional del funcionamiento del dispositivo CARBOMED a distintas presiones.                       | 77        |

## Índice de figuras

|                                                                                                                                            |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Figura 7.4.a</b> Bandas de absorción de la atmósfera terrestre (Wikipedia).....                                                         | 24 |
| <b>Figura 8.1.a</b> Configuración para la medición de pH. Figura creada con BioRender.com .....                                            | 29 |
| <b>Figura 8.3.a</b> Ilustración de la preparación de muestras en cubeta óptica expuesta a un laser. Figura creada con BioRender.com .....  | 30 |
| <b>Figura 8.3.b</b> Arreglo experimental para espectroscopía de lente térmica. Fuente: elaboración propia. ....                            | 31 |
| <b>Figura 8.3.c</b> Diagrama del proceso experimental para la generación y captura de patrones de difracción. Figura con ayuda de IA. .... | 32 |
| <b>Figura 8.7.8.7.a</b> Montaje experimental para medir el volumen de CO <sub>2</sub> inyectado. ....                                      | 37 |
| <b>Figura 11.1.a</b> <i>pH de la muestra con agitador vs sin agitador</i> .....                                                            | 42 |
| <b>Figura 11.1.b</b> <i>Medición de pH durante la reacción de reversión.</i> .....                                                         | 43 |
| <b>Figura 11.3.a</b> Fotografía del sistema de inyección de CO <sub>2</sub> .....                                                          | 46 |
| <b>Figura 11.3.b</b> Patrón de difracción del agua como referencia. ....                                                                   | 47 |
| <b>Figura 11.3.c</b> Patrón de difracción de muestra con mayor concentración de CO <sub>2</sub> . ....                                     | 47 |
| <b>Figura 11.3.d</b> Canal rojo del patrón de difracción .....                                                                             | 48 |
| <b>Figura 11.3.e</b> Canal verde del patrón de difracción. ....                                                                            | 49 |
| <b>Figura 11.3.f</b> Canal azul del patrón de difracción .....                                                                             | 49 |
| <b>Figura 11.3.g</b> Combinación de Canal R y G .....                                                                                      | 50 |
| <b>Figura 11.4.a</b> Porcentaje de área luminosa en relación con la muestra de agua. ....                                                  | 52 |
| <b>Figura 11.4.b</b> Desviación estándar para el patrón de cada pulso de CO <sub>2</sub> .....                                             | 53 |
| <b>Figura 11.5.a</b> Comparación visual del ajuste de los diferentes modelos al patrón de difracción de una muestra de agua. ....          | 54 |
| <b>Figura 11.5.b</b> <i>Ajuste de Bessel al perfil de intensidad del color rojo</i> .....                                                  | 56 |
| <b>Figura 11.5.c</b> Ajuste de Bessel al perfil de intensidad del color verde .....                                                        | 56 |
| <b>Figura 11.5.d</b> Ajuste de Bessel con desviación estándar y línea de tendencia .....                                                   | 57 |
| <b>Figura 11.5.e</b> Desviación estándar de los ajustes de la función de Bessel modificada .....                                           | 58 |
| <b>Figura 11.6.a</b> <i>Límite de presión y volumen de CO<sub>2</sub> por pulso.</i> .....                                                 | 62 |
| <b>Figura 11.7.a</b> Visualización de límite de presión en la inyección de CO <sub>2</sub> .....                                           | 67 |
| <b>Figura 11.7.b</b> Cambio de pCO <sub>2</sub> y pH en función del número de pulso .....                                                  | 67 |
| <b>Figura 11.8.a</b> Frecuencia de Bessel ajustada en función de concentración molar de CO <sub>2</sub> .....                              | 68 |

## Índice de tablas

|                                                                                                        |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Tabla 9.a</b> Detalles técnicos del dispositivo de inyección de CO <sub>2</sub> .....               | 38 |
| <b>Tabla 9.b</b> Detalles técnicos de la sonda de pH Bante220.....                                     | 39 |
| <b>Tabla 11.a</b> Valores de pCO <sub>2</sub> correspondientes a los diferentes números de pulsos..... | 61 |
| <b>Tabla 11.b</b> Valores de concentración de compuestos en función de pCO <sub>2</sub> .....          | 66 |



## Abreviaturas y siglas

- **CO<sub>2</sub>**: Dióxido de carbono.
- **CO<sub>2</sub> (aq)**: Dióxido de carbono disuelto en agua.
- **CO<sub>2</sub> (g)**: Dióxido de carbono en fase gaseosa.
- **H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>**: Ácido carbónico.
- **HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>**: Ion bicarbonato.
- **CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>**: Ion carbonato.
- **H<sup>+</sup>**: Ion hidrógeno.
- **OH<sup>-</sup>**: Ion hidroxilo.
- **NaCl**: Cloruro de sodio.
- **K<sub>a1</sub>**: Primera constante de disociación del ácido carbónico.
- **K<sub>a2</sub>**: Segunda constante de disociación del ácido carbónico.
- **K<sub>h</sub>**: Constante de hidratación del dióxido de carbono.
- **K<sub>hid</sub>**: Constante de hidratación (notación empleada en las ecuaciones del modelo).
- **K<sup>H</sup>**: Constante de Henry.
- **pK<sub>a</sub>**: Logaritmo negativo de la constante de disociación ácida.
- **LED**: Diodo emisor de luz.
- **CFATA**: Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada.
- **M.S.H.**: Manual de Seguridad e Higiene.

## Resumen

La espectroscopia laser de lente térmica es una herramienta fototérmica altamente sensible que ha adquirido gran relevancia en los últimos años debido a su amplio rango de aplicaciones en análisis químico y físico. En este trabajo se explora el uso de esta técnica para la detección de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) disuelto en agua mediante el análisis de patrones de difracción generados por un arreglo experimental con láseres de excitación de 1040 nm y sondeo con luz visible. Las imágenes de los patrones fueron capturadas con una cámara comercial en el espectro visible y posteriormente analizadas mediante herramientas computacionales.

Para generar muestras con diferentes concentraciones de  $\text{CO}_2$  se implementó un sistema controlado de inyección de gas. Asimismo, se realizó una caracterización inicial de las propiedades fisicoquímicas de las muestras mediante la medición del pH. El análisis óptico se llevó a cabo mediante el procesamiento de las imágenes de los patrones de difracción, lo cual incluyó la detección de contornos de las regiones luminosas, el cálculo de las áreas correspondientes a los anillos de difracción y el ajuste de los perfiles de intensidad experimentales a una función de Bessel de orden cero.

Los resultados muestran que incluso a bajas concentraciones la presencia de  $\text{CO}_2$  produce cambios medibles en la intensidad y estructura de los patrones de difracción asociados al lente térmico de la muestra. Estos hallazgos confirman la viabilidad de la espectroscopía de lente térmica como método para la detección de  $\text{CO}_2$  en soluciones acuosas y sugieren que optimizaciones en la preparación de muestras y en la configuración óptica podrían incrementar significativamente la sensibilidad del sistema.

**Palabras clave:** espectroscopía de lente térmica, detección de  $\text{CO}_2$ , patrones de difracción, efectos termo-ópticos.

## Abstract

Thermal lens laser spectroscopy is a highly sensitive photothermal tool that has gained significant importance in recent years due to its wide range of applications in chemical and physical analysis. This work explores the use of this technique for the detection of carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ) dissolved in water by analyzing diffraction patterns generated by an experimental setup with 1040 nm excitation and visible light probing. The pattern images were captured with a commercial camera in the visible spectrum and subsequently analyzed using computational tools.

A controlled gas injection system was implemented to generate samples with different  $\text{CO}_2$  concentrations. An initial characterization of the physicochemical properties of the samples was also performed by measuring their pH. The optical analysis was carried out by processing the diffraction pattern images, which included detecting the contours of the luminous regions, calculating the areas corresponding to the diffraction rings, and fitting the experimental intensity profiles to a zero-order Bessel function.

The results show that even at low concentrations, the presence of  $\text{CO}_2$  produces measurable changes in the intensity and structure of the diffraction patterns associated with the sample's thermal lens. These findings confirm the viability of thermal lens spectroscopy as a method for detecting  $\text{CO}_2$  in aqueous solutions and suggest that optimizations in sample preparation and optical configuration could significantly increase the system's sensitivity.

**Keywords:** thermal lens spectroscopy,  $\text{CO}_2$  detection, diffraction patterns, thermo-optical effects.

# 1. Introducción

En el Laboratorio de Óptica y Fotónica del Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada de la UNAM existe una línea de investigación enfocada en la producción de metanol mediante fotocatalisis heterogénea en superficies de nanopartículas, usando moléculas de agua y  $\text{CO}_2$ . La idea, en esencia, es separar el hidrógeno del agua y el carbono del  $\text{CO}_2$  para después recombinarlos en un nuevo hidrocarburo. Sin embargo, antes de pensar en el producto final, es indispensable entender y medir lo que está ocurriendo en cada etapa del proceso. No se puede transformar lo que no se puede observar.

En este contexto surge la necesidad de contar con herramientas ópticas que permitan detectar y cuantificar la presencia de  $\text{CO}_2$  en medios líquidos, particularmente en agua. Aunque existen sensores comerciales para  $\text{CO}_2$  en fase gaseosa basados en absorción infrarroja, trasladar ese principio a soluciones acuosas no es trivial. El  $\text{CO}_2$  disuelto alcanza concentraciones relativamente bajas y las variaciones físicas que produce en el medio pueden ser sutiles. Aun así, esas pequeñas variaciones existen, y si se cuenta con la técnica adecuada, pueden hacerse visibles.

La espectroscopía de lente térmica con láseres representa una alternativa interesante (Valdés et al., 2025a,b,c; Shrestha et al., 2017; Domínguez-Juárez et al., 2015). Esta técnica se basa en un principio relativamente simple: cuando una muestra absorbe radiación del láser, se genera un aumento local de temperatura que modifica el índice de refracción del medio, formando lo que se conoce como un “lente térmico” (Gordon et al. 1964; Domínguez-Juárez et al., 2023b). En un arreglo tipo bombeo-sondeo (pump-probe), un láser infrarrojo induce el calentamiento y un segundo haz — en el rango visible o incluso luz blanca generada a partir del sistema— permite visualizar los efectos de esa perturbación térmica a través de patrones de difracción (Domínguez-Juárez et al., 2023c). De esta forma, la información térmica se traduce en información óptica medible (Valdés et al., 2022).

El reto central de este trabajo consiste entonces en responder una pregunta concreta: ¿es posible detectar bajas concentraciones de  $\text{CO}_2$  en agua mediante el análisis de los patrones de difracción generados por espectroscopía de lente térmica? Para abordar esta pregunta, no solo es necesario generar los patrones, sino analizarlos con suficiente sensibilidad. Las diferencias entre una muestra de agua pura y una muestra con  $\text{CO}_2$  disuelto pueden ser pequeñas, por lo que el tratamiento computacional de los perfiles de intensidad se vuelve una parte esencial del estudio.

Más allá del desarrollo instrumental, este trabajo se enmarca en una problemática mayor. El dióxido de carbono no es solo un reactivo más; es una molécula central en los procesos energéticos y



ambientales actuales. Entender su comportamiento en agua es relevante tanto para estudios de fotosíntesis artificial como para procesos relacionados con captura de carbono y energías limpias. Si se logra establecer una metodología óptica no invasiva, sensible y reproducible para su detección en fase líquida, se estaría aportando una herramienta útil no solo para este proyecto en particular, sino para otras áreas donde el  $\text{CO}_2$  en solución juega un papel fundamental.

Así, esta tesis no busca únicamente generar patrones de difracción, sino comprender qué información física contienen y hasta qué punto pueden utilizarse como una ventana para estudiar procesos termo-ópticos inducidos por la presencia de  $\text{CO}_2$  en agua. En última instancia, medir con luz lo que ocurre a nivel molecular es una manera de acercarnos, paso a paso, a sistemas energéticos más entendidos y, potencialmente, más sostenibles (Valdés et al., 2021; Valdés et al., 2022; Meza-Arroyo et al., 2024)

## 2. Planteamiento del problema

Actualmente, la detección y medición de  $\text{CO}_2$  en medios líquidos es escasa y representa un desafío considerable. La mayoría de sensores comerciales capaces de detectar la presencia de  $\text{CO}_2$ , trabajan solo en fase gaseosa. Estos dispositivos funcionan haciendo pasar luz infrarroja a través de una muestra gaseosa, donde las moléculas de  $\text{CO}_2$  absorben longitudes de onda específicas, dejando pasar el resto del espectro, el cual se mide mediante un sensor infrarrojo no dispersivo (NDIR) (CO2Meter, 2024).

La carencia en herramientas de detección de  $\text{CO}_2$  presenta un área de desarrollo y motiva la exploración de nuevas metodologías ópticas, basadas en la banda de absorción del  $\text{CO}_2$ , la espectroscopía de lente térmica y la generación de patrones de difracción. A pesar de que existen otros acercamientos al problema, como la medición de pH para el cálculo directo de  $\text{CO}_2$ , se debe considerar que el uso de marcadores y medidores implica un contacto directo con la muestra, lo cual disturba los procesos químicos de la misma.

El método propuesto en esta investigación busca utilizar las propiedades físicas del dióxido de carbono y la relación entre los patrones de difracción y la temperatura de la muestra. Se combina el uso de luz blanca e infrarroja para el estudio de muestras acuosas con distintas concentraciones de  $\text{CO}_2$ . Sin embargo, debido a la baja concentración de  $\text{CO}_2$  naturalmente alcanzada al disolverse en agua y el uso de herramientas accesibles, las variaciones entre los patrones de difracción generados resultan sutiles y difíciles de detectar. Esta característica del sistema exige un análisis computacional preciso y sensible.

En este contexto, el problema central que aborda esta investigación puede formularse de la siguiente manera:

¿Es posible detectar la presencia de bajas concentraciones de  $\text{CO}_2$  en agua mediante el análisis de los patrones de difracción generados por espectroscopía de lente térmica?

### 3. Justificación

En el marco de un proyecto de investigación sobre el estudio de la fotosíntesis artificial, el Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada (CFATA) de la UNAM ha identificado la necesidad de un método óptico que permita determinar la concentración de  $\text{CO}_2$  disuelto en medios acuosos.

Conocer el número de moléculas de  $\text{CO}_2$  es indispensable para el cálculo de reactivos, energía de activación y otros parámetros. Las reacciones relacionadas con el  $\text{CO}_2$  son diversas e incluyen procesos biológicos, estudio de acidificación del océano, procesos industriales de fermentación y más. Adicionalmente, el análisis de los efectos del  $\text{CO}_2$  en soluciones acuosas resulta fundamental en diversas áreas, como la captura del carbono en el océano (R., 2026)(Cook, 2007), una técnica utilizada para mitigar el cambio climático. En este sentido, los avances alcanzados en esta tesis pueden tener un impacto positivo tanto en el proyecto general como en una amplia gama de aplicaciones relacionadas con la fisicoquímica, energías limpias y análisis óptico de muestras.

En caso de validar el método de estudio propuesto, se obtendría una nueva técnica óptica para la caracterización de muestras de  $\text{CO}_2$  en agua. Este método, basado en la interacción de luz blanca y el lente térmico de la muestra, presenta ventajas importantes: no altera la composición química de la solución, requiere cantidades mínimas de soluto y, gracias al uso de luz blanca, permite la captura de los patrones de difracción mediante cámaras fotográficas convencionales. De esta forma, la metodología propuesta sería más accesible, reproducible y aplicable a un gran rango de concentraciones de soluto.

## 4. Antecedentes

En cualquier configuración de lente térmica, la composición de la muestra desempeña un papel fundamental en la generación y magnitud de la señal, ya que parámetros como la conductividad térmica  $k$  y la dependencia del índice de refracción con la temperatura ( $dn/dT$ ) gobiernan la sensibilidad de la técnica (Valdés et al., 2025a,b,c; Domínguez-Juárez et al., 2015; Filichkina et al., 1993). En el caso de esta investigación, el objeto de estudio son muestras de  $\text{CO}_2(\text{g})$  disuelto en agua, debido a su relevancia en diversos procesos naturales, entre ellos la fotosíntesis.

Por sí sola, el agua es un solvente poco favorable para mediciones mediante lente térmica, debido a su alta conductividad térmica y a sus bajos valores de  $dn/dT$ . Con el objetivo de mejorar la sensibilidad de la técnica, diversos trabajos se han enfocado en modificar las propiedades del solvente (Domínguez-Juárez et al., 2015; Loeb et al., 2025; Franko & Tran, 1989), ya sea mediante el uso de electrolitos y surfactantes (Tran & Van Fleet, 1988) o mediante la adición de co-solventes orgánicos al agua (Filichkina et al., 1993).

En este contexto, se espera que la presencia de  $\text{CO}_2$  disuelto tenga un efecto similar, incrementando la sensibilidad del lente térmico. Esto se debe a que los modos vibracionales del  $\text{CO}_2$  generan bandas intensas de absorción en la región del infrarrojo, así como sobretonos y bandas de combinación que se extienden hacia el infrarrojo cercano (Atkins & de Paula, 2014), región en la cual se encuentra la longitud de onda del láser de excitación utilizado en la configuración óptica de este trabajo (1040 nm).

La presencia de  $\text{CO}_2$  disuelto puede modificar tanto la absorción de radiación como las propiedades termofísicas del medio, amplificando el calentamiento inducido por el láser y, por lo tanto, la variación espacial del índice de refracción. Esta variación es directamente responsable de la formación del lente térmico, cuya alteración puede observarse en el patrón de difracción del haz de prueba (Valdés et al., 2025a,b,c; Dovichi & Bialkowski, 1987). Por ello, el análisis de estos patrones puede emplearse como una herramienta para la detección de  $\text{CO}_2$  y para el estudio térmico de la muestra.

Respecto a la viabilidad de este enfoque, es importante señalar que estudios previos realizados en el CFATA han utilizado el patrón de difracción como herramienta de caracterización de líquidos (Moocarme et al., 2014). En particular, el trabajo publicado por Domínguez-Juárez et al. (2023) analizó muestras de agua, metanol, etanol y 1-propanol mediante los patrones de difracción inducidos fototérmicamente. Dichos resultados demuestran que el análisis de estos patrones puede emplearse de manera efectiva para estudiar las propiedades de diferentes líquidos.

Considerando además que el  $\text{CO}_2$  presenta bandas de absorción en la región infrarroja, se espera que al utilizar un láser de 1040 nm para la generación de los patrones de difracción, las muestras acuosas con  $\text{CO}_2$  presenten un incremento de temperatura mayor que el del agua pura. Este efecto podría amplificar la intensidad del lente térmico, permitiendo detectar cambios en el patrón de difracción incluso a bajas concentraciones de  $\text{CO}_2$ .

## 5. Hipótesis

### 5.1. Hipótesis general

La presencia de  $\text{CO}_2(\text{g})$  en muestras acuosas tendrá un efecto amplificador sobre el lente térmico que se genera al incidir un láser de longitud de onda infrarroja. El aumento de intensidad del lente térmico de la muestra se reflejará en las características del patrón de difracción, tanto en el área luminosa como en los parámetros del ajuste de la función de Bessel aplicada al perfil de intensidad.

### 5.2. Hipótesis específica

- **Parte A:** Se espera que el análisis computacional revele una diferencia significativa —mayor que el error experimental estimado— entre el patrón de difracción de una muestra de agua pura y el de la muestra con mayor concentración de  $\text{CO}_2$ .
- **Parte B:** Se espera lograr una resolución suficiente para distinguir al menos cuatro muestras con diferentes concentraciones de  $\text{CO}_2$ , ya sea mediante diferencias en el área luminosa del patrón o en los parámetros del ajuste Bessel.

#### Hipótesis nula ( $H_0$ )

La concentración de  $\text{CO}_2$  disuelto no produce cambios estadísticamente significativos en los patrones de difracción generados en las muestras acuosas, más allá del error experimental.

#### Hipótesis alternativa ( $H_a$ )

La concentración de  $\text{CO}_2$  disuelto sí produce cambios estadísticamente significativos en los patrones de difracción, ya sea en el área luminosa o en los parámetros del ajuste de la función de Bessel.

## 6. Objetivos

### 6.1. Objetivo general

Estudio del efecto del  $\text{CO}_2$  disuelto en agua sobre la absorción de radiación infrarroja y la intensidad del lente térmico inducido por un láser de 1040 nm, a través del estudio computacional de los patrones de difracción generados. El propósito es comprender los cambios químicos y termo-ópticos asociados, optimizar la metodología experimental y determinar si existen diferencias significativas en función de la concentración de  $\text{CO}_2$ .

### 6.2. Objetivos particulares

- Diseñar e implementar un sistema óptimo de inyección de  $\text{CO}_2$  para la preparación controlada de las mezclas utilizadas en el experimento.
- Integrar un sistema de medición continua de presión en la cubeta óptica para monitorear las condiciones experimentales y poder estimar los niveles de pH de la muestra en cada momento.
- Capturar cinco imágenes de los patrones de difracción generados por cada muestra utilizando una cámara Nikon, garantizando que no haya saturación en el canal rojo en la imagen RGB.
- Desarrollar un programa en Python para el análisis computacional de los patrones de difracción, que permita extraer características relevantes como el área luminosa o los parámetros de ajuste de una función Bessel.
- Establecer el patrón de difracción del agua pura como referencia para la comparación con las muestras que contienen  $\text{CO}_2$  disuelto.
- Realizar mediciones con distintas concentraciones de  $\text{CO}_2$  para analizar sus respectivos patrones de difracción y compararlos con el patrón de referencia.
- Considerar los errores de medición en el análisis de resultados y extraer conclusiones sobre el efecto del  $\text{CO}_2$  disuelto en el comportamiento óptico y térmico de la mezcla, con el fin de aportar al entendimiento termodinámico del sistema.

## 7. Marco teórico

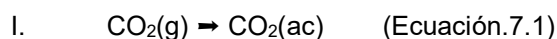
### 7.1. Química del CO<sub>2</sub> en agua

#### 7.1.1. Propiedades químicas del CO<sub>2</sub>

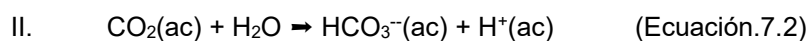
El dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) es un gas incoloro e inodoro con una masa molecular de 44,01 g/mol. Es un compuesto químico estable en condiciones normales de temperatura y presión, pero puede reaccionar con otros compuestos en determinadas condiciones (U.S. National Library of Medicine, 2022).

#### 7.1.2. Reacciones del CO<sub>2</sub> en agua

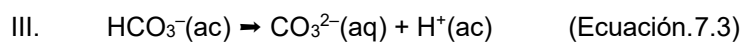
De acuerdo con Hale, G. (2018), el proceso de tres etapas que ocurre cuando mezclamos CO<sub>2</sub> y agua es el siguiente:



Esta reacción representa la disolución del dióxido de carbono en agua. Cuando el CO<sub>2</sub> se encuentra en fase líquida, este ambiente permite que ocurran las reacciones que se muestran en las etapas II y III. A pesar de que muy poco del CO<sub>2</sub> presente en la atmósfera se disuelve en los océanos, la mayor contribución de este porcentaje se encuentra en forma del ión bicarbonato que se obtiene de la siguiente reacción:



El dióxido de carbono disuelto reacciona con el agua y se disocia en un ion de bicarbonato (HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>) y un ion de hidrógeno (H<sup>+</sup>). Este proceso se conoce como reacción de acidificación. Esta simple reacción muestra la repercusión que tiene el cambio climático en los océanos. En promedio los océanos tienen un pH básico, alrededor de 8.2, sin embargo, debido al aumento de CO<sub>2</sub> en la atmósfera, la cantidad del ion H<sup>+</sup> presente ha incrementado también, disminuyendo continuamente el valor de pH en los océanos. Además, existe una reacción posterior a esta fase, que introduce un nuevo H<sup>+</sup>, proveniente del ion bicarbonato secundario, es decir:



Esta reacción produce también iones  $H^+$  a partir de separarse del ion bicarbonato. En este proceso es más difícil para el  $H^+$  secundario separarse del ion bicarbonato y obtener  $CO_3^{2-}$  (ac) disuelto.

## 7.2. Procesos de absorción de $CO_2$

### 7.2.1. Absorción física y química de $CO_2$ en agua

De acuerdo con Huang (2003), la absorción de dióxido de carbono en agua puede ocurrir tanto física como químicamente. En la absorción física, el  $CO_2$  disuelto en agua se mantiene capturado debido a las fuerzas intermoleculares y ocurre una reacción química. En cambio, como vimos en la reacción II, en la absorción química, el  $CO_2$  reacciona con el agua para formar ácido carbónico ( $H_2CO_3$ ) según la siguiente ecuación:



Este proceso tiene importantes implicaciones en las propiedades químicas del agua. La disolución de  $CO_2$  afecta directamente el pH del agua provocando un cambio en su alcalinidad. Es por esto que la absorción de  $CO_2$  es un proceso importante en la contaminación del medio ambiente, principalmente al considerar que el  $CO_2$  es un gas de efecto invernadero (Huang, 2003; IPCC, 2023).

### 7.2.2. Ley de Henry

La disolución de gases en líquidos es un fenómeno fundamental en múltiples procesos físicos, químicos y biológicos. En presiones bajas, una de las relaciones más importantes que describe este comportamiento es la ley de Henry, la cual establece que, a temperatura constante, la cantidad de gas que se disuelve en un líquido es directamente proporcional a la presión parcial de dicho gas sobre la superficie del líquido. Matemáticamente, esta relación puede expresarse como:

$$C = k_H P \quad (\text{Ecuación.7.5})$$

donde  $C$  es la concentración del gas disuelto en el líquido,  $P$  es la presión parcial del gas en la fase gaseosa y  $k_H$  es la constante de la ley de Henry, la cual depende del par gas-solvente y de la temperatura (Atkins & de Paula, 2014).

Esta relación describe el equilibrio entre la fase gaseosa y la fase líquida y se utilizará como una primera aproximación en esta investigación. Cuando la presión parcial del gas aumenta, una mayor cantidad de moléculas se disuelven en el líquido hasta alcanzar un nuevo estado de equilibrio. De

manera análoga, si la presión parcial disminuye, parte del gas disuelto se libera nuevamente hacia la fase gaseosa.

La constante de Henry no es universal, sino que varía dependiendo del sistema gas–solvente y de la temperatura. En el caso del dióxido de carbono disuelto en agua, el valor típico de la constante de Henry a **25 °C** es aproximadamente:

$$k_H = 3.3 \times 10^{-2} \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{atm}} \quad (\text{Ecuación.7.6})$$

Este valor indica la concentración de CO<sub>2</sub> que puede disolverse en agua por cada atmósfera de presión parcial del gas (Sander R., 2023).

La aplicación de la ley de Henry permite estimar la concentración de CO<sub>2</sub> disuelto a partir de la presión parcial del gas en el ambiente o en un sistema cerrado. En sistemas naturales, como cuerpos de agua o procesos biológicos, esta relación es particularmente relevante debido al papel del CO<sub>2</sub> en fenómenos como la fotosíntesis, el equilibrio ácido–base del agua y el ciclo global del carbono (Brown et al., 2018).

### 7.2.3. Tasa de transferencia de masa

La tasa de transferencia de masa describe la velocidad a la que el CO<sub>2</sub> pasa de la fase gaseosa a la fase líquida. Esta tasa depende de la superficie de contacto entre el gas y el líquido, la velocidad de agitación y la concentración de CO<sub>2</sub> en la fase gaseosa. También puede verse afectada por la presencia de otros gases en la mezcla y por la formación de burbujas de gas en la interfaz gas-líquido (Mondal et al., 2016).

### 7.2.4. Métodos de absorción de CO<sub>2</sub> en agua

Aunque en el presente trabajo no se emplean agentes o compuestos químicos para mejorar la disolución de CO<sub>2</sub>, es importante mencionar algunos de los métodos utilizados actualmente para su captura o absorción en medios acuosos. De acuerdo con Xu (2015), entre los principales se encuentran los siguientes:

- Absorción con aminas: Utiliza compuestos químicos llamados aminas, que reaccionan con el CO<sub>2</sub> para formar carbamatos y bicarbonatos. Las aminas más comúnmente utilizadas incluyen monoetanolamina (MEA), dietanolamina (DEA) y metildietanolamina (MDEA).

- Absorción con hidróxido de sodio: Este método se basa en la reacción del  $\text{CO}_2$  con una solución de hidróxido de sodio ( $\text{NaOH}$ ) para formar carbonato de sodio ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ). Este método es menos costoso que la absorción con aminas, pero también menos eficiente.

- Membranas de separación de gas: Utiliza membranas para separar el  $\text{CO}_2$  del aire o de otros gases. Las membranas están diseñadas para permitir que el  $\text{CO}_2$  pase a través de ellas y se disuelva en el agua. Este método es menos costoso y requiere menos energía que los métodos de absorción química, pero también es menos eficiente (Xu, 2015).

### **7.3. Factores que influyen en la absorción de $\text{CO}_2$**

La absorción de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) es un proceso importante en diversas aplicaciones, como la purificación de gases y la captura de  $\text{CO}_2$  en procesos industriales. En este apartado se presentan los principales factores que influyen en la absorción de  $\text{CO}_2$ .

#### **7.3.1. Temperatura y presión**

La temperatura y la presión son factores importantes que influyen en la absorción de  $\text{CO}_2$  en líquidos. En general, se observa que la absorción de  $\text{CO}_2$  aumenta a medida que la temperatura disminuye y también cuando la presión aumenta. Sin embargo, la influencia de estos factores puede depender del sistema de absorción en cuestión y de la naturaleza de los solventes utilizados (Samanta & Bandyopadhyay, 2009).

#### **7.3.2. Efecto del pH en la absorción de $\text{CO}_2$**

El valor de pH es un factor importante que influye en la absorción de  $\text{CO}_2$  en soluciones acuosas. En general, se observa que la absorción de  $\text{CO}_2$  aumenta a medida que el pH disminuye. Esto se debe a que a pH más bajo, el  $\text{CO}_2$  se convierte en ácido carbónico, lo que favorece su solubilidad en agua (Hikita et al., 1979).

#### **7.3.3. Concentración de $\text{CO}_2$ en el gas de entrada**

Como en todo sistema dinámico, la concentración de  $\text{CO}_2$  en el gas de entrada es un factor importante que influye en la absorción de  $\text{CO}_2$ . En general, se observa que la absorción de  $\text{CO}_2$  aumenta a medida que la concentración de  $\text{CO}_2$  en el gas de entrada aumenta, por lo que se debe considerar maximizar la cantidad y pureza del gas (Samanta, A., & Bandyopadhyay, S. S., 2009).

#### 7.3.4. Agitación y mezcla

La agitación y la mezcla son factores importantes que influyen en la absorción de  $\text{CO}_2$ . En general, en un sistema cerrado, se observa que la absorción de  $\text{CO}_2$  aumenta a medida que la agitación aumenta. Esto se debe a que la agitación y la mezcla favorecen la transferencia de masa entre el gas y el solvente, lo que aumenta la tasa de absorción (Hikita et al., 1979).

Por otro lado, al introducir agitación en un sistema abierto, ocurre la gasificación y liberación del  $\text{CO}_2$  disuelto en el líquido, debido a la diferencia de presiones, como ocurre en los refrescos embotellados. Otra variable a considerar es la posición del agitador, ya que una agitación cercana a la superficie de la interfaz gas-líquido puede provocar la liberación del  $\text{CO}_2$ .

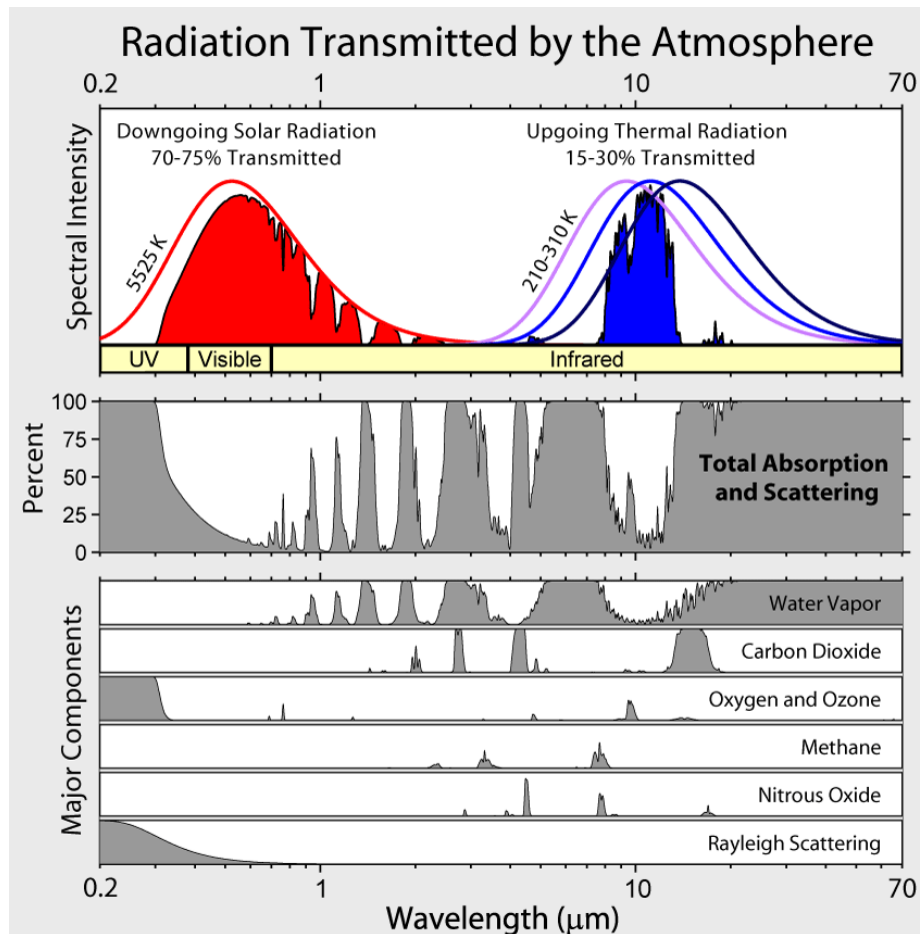
#### 7.3.5. Otros factores

Además de los factores mencionados anteriormente, existen otros factores que pueden influir en la absorción de  $\text{CO}_2$ , como la naturaleza del solvente, la presencia de impurezas y otros gases en el gas de entrada, entre otros (Ban, Keong & Mohd Shariff, 2014).

### 7.4. Espectros de absorción y mezcla $\text{CO}_2$ y $\text{H}_2\text{O}$

En general, cada compuesto en la naturaleza tiene un espectro de absorción de radiación. Como ejemplo, en la *Figura 7.4.a* se muestran las bandas de absorción del  $\text{CO}_2$ , el agua y otros compuestos presentes en la atmósfera de la tierra.

La imagen muestra la radiación de cuerpo negro de los principales compuestos involucrados en la radiación transmitida del sol y el planeta tierra. Además se muestra la absorción de radiación y scattering del: vapor de agua, dióxido de carbono, oxígeno y ozono, metano y óxido nitroso. Se observa también la dispersión de Rayleigh y la absorción total. La intensidad espectral de la radiación generada por la Tierra se muestra en azul y la radiación solar que llega a la atmósfera en rojo.



**Figura 7.4.a** Bandas de absorción de la atmósfera terrestre (Wikipedia)

#### 7.4.1. Espectro de absorción del CO<sub>2</sub>

El CO<sub>2</sub> presenta bandas de absorción características que corresponden a los modos vibracionales de la molécula. La banda de absorción más notoria se encuentra cerca del rango de los 15 μm, esta ayuda a la reducción de la radiación que llega a la superficie terrestre y disminuye el efecto de las variaciones de temperatura en la superficie (Möller, 1963; IPCC, 2023).

Además de estas bandas fundamentales, el CO<sub>2</sub> también presenta sobretonos y bandas de combinación originadas por transiciones vibracionales de orden superior. Aunque estas transiciones tienen intensidades considerablemente menores que las fundamentales, pueden extenderse hacia regiones de mayor energía del espectro, incluyendo el infrarrojo cercano (near-infrared, NIR). Diversos estudios espectroscópicos han identificado transiciones débiles del CO<sub>2</sub> en esta región, por ejemplo, alrededor de 830 nm y otras longitudes de onda cercanas, correspondientes a sobretonos vibracionales y combinaciones de modos moleculares (Campargue et al., 2015; Dana et al., 1994).

Como consecuencia, aunque la absorción más intensa del  $\text{CO}_2$  ocurre en el infrarrojo medio, su espectro no se limita exclusivamente a esta región. La presencia de sobretonos y bandas de combinación permite la observación de absorciones débiles en el infrarrojo cercano.

#### **7.4.2. Espectro de absorción del $\text{H}_2\text{O}$**

La banda de absorción del  $\text{H}_2\text{O}$  es muy amplia y cubre la mayoría del rango infrarrojo. Alrededor de  $12\ \mu\text{m}$  a  $18\ \mu\text{m}$ , las bandas de absorción del agua y del  $\text{CO}_2$  coinciden, por lo que la absorción simultánea entre ambos compuestos reduce aún más la radiación que llega a la superficie terrestre. En comparación con una hipotética atmósfera seca, nuestra atmósfera es 34% más efectiva en la reducción de la radiación que alcanza la superficie (Möller, 1963).

#### **7.4.3. Cambio de temperatura debido al cambio de concentración del $\text{CO}_2$**

El aumento de la concentración de  $\text{CO}_2$  y la disminución subsecuente de la radiación neta saliente de la superficie terrestre implican un aumento de la temperatura. Por ejemplo, un aumento del nivel de  $\text{CO}_2$  del 10% (de 300 a 330 ppm) causa una disminución de la radiación neta de 0.5% en la superficie terrestre (Möller, 1963; IPCC, 2023).

### **7.5. Análisis de muestras mediante herramientas ópticas**

#### **7.5.1. Lente térmica**

En el campo de la termo-óptica, uno de los métodos más desarrollados en las últimas décadas es el estudio de muestras a través de la generación de lentes térmicos (Valdés et al., 2025a,b). Este fenómeno se basa en la absorción de radiación óptica y en la subsecuente relajación no radiativa de los estados excitados dentro de una muestra (M. Colcombe, D. Snook. 1999).

La relajación no radiativa produce una lente térmica mediante un cambio localizado de temperatura, lo que a su vez provoca una variación local del índice de refracción. La intensidad de la lente inducida se mide utilizando un láser de prueba (probe beam) que atraviesa el gradiente de índice de refracción, lo cuál perturba el perfil de intensidad del láser. Estas mediciones pueden relacionarse directamente con la absorbancia y las propiedades termo-ópticas de la muestra estudiada. La técnica de lente térmica fue reportada por primera vez por Gordon *et al.* (1964).

El cambio de índice de refracción puede considerarse como un elemento óptico, de cierta forma análogo a un lente, prisma o espejo curvado. Sin embargo, el elemento termo-óptico es inusual en diferentes aspectos (Valdés et al., 2025a). El más importante, es el cambio de las propiedades del lente térmico en el tiempo. Por ejemplo, ajustando el nivel de potencia del láser de bombeo se puede aumentar o disminuir las distorsiones del índice de refracción (J. Dovichi, E. Bialkowski, 1987).

### 7.5.2. Relación entre temperatura e índice de refracción

Expresado matemáticamente, la derivada del índice de refracción respecto a la temperatura, relaciona el incremento de temperatura producido por la absorción del láser,  $\Delta T$ , con el cambio en el índice de refracción delta. Esta relación  $\Delta n/\Delta T$  varía con la temperatura en cualquier solvente. Sin embargo, para cambios de temperatura pequeños  $\Delta n/\Delta T$  puede ser considerado una constante, de tal forma que delta n se calcula como el producto de  $\Delta n/\Delta T$  por el incremento de temperatura, es decir:

$$\Delta n = \frac{dn}{dt} \Delta T \quad (\text{Ecuación.7.7})$$

Si se desea considerar las variaciones de  $dn/dt$  con la temperatura, entonces la expresión debe ser representada mediante una integral.

$$\Delta n = \int_{T_0}^{T_0+\Delta T} \frac{dn}{dt} dT \quad (\text{Ecuación.7.8})$$

donde  $T_0$  representa la temperatura inicial de la muestra (Valdés et al., 2025a; J. Dovichi, E. Bialkowski, 1987).

### 7.5.3. Espectroscopía de lente térmica.

Actualmente, la espectrometría de lente térmica (TLS por sus iniciales en inglés) representa uno de los métodos más sensibles de espectroscopia de absorción molecular desde el punto de vista de la química analítica sin contacto. La técnica funciona bajo la asunción de que la intensidad de la lente térmica es directamente proporcional a la absorbancia de la muestra y, por lo tanto, a la concentración y al coeficiente de absorción del compuesto de prueba (Proskurnin et al., 2015). De esta forma se establece una relación entre la intensidad de la lente térmica y el soluto de la mezcla.

Es por este motivo que la TLS es un método espectroscópico de vanguardia, cada vez más utilizado para la determinación de trazas de diferentes compuestos, en particular en biología y medicina (Proskurnin M.A. 2014). Asimismo, esta técnica ofrece la ventaja de combinar una alta sensibilidad

instrumental, un análisis no destructivo y una gran aplicabilidad en distintas metodologías (Moocarme et al., 2014; Loeb et al., 2025; Shrestha et al., 2017).

## **7.6. Fotosíntesis artificial y sus aplicaciones**

La fotosíntesis artificial se puede dividir en dos pasos, la fase luminosa en la cual con presencia de luz solar se puede obtener hidrógeno y oxígeno a partir de la fotólisis del agua. La fase oscura en la cual ocurre la fijación de moléculas de dióxido de carbono. La fotosíntesis artificial es un proceso que busca imitar la fotosíntesis de las plantas para convertir dióxido de carbono y agua en energía química representada con los carbohidratos y el oxígeno (Collings, A. F., & Critchley, C., 2007).

### **7.6.1. Aplicaciones**

Tiene el potencial de convertirse en una fuente de energía renovable y sostenible, a la vez que reduce las emisiones de gases de efecto invernadero. Hay sistemas de fotosíntesis artificial que se basan en el uso de semiconductores para absorber luz solar y generar pares electrón-hueco que se utilizan para hacer reacciones químicas y producir combustibles solares (Meza-Arroyo et al., 2024). Como ejemplo está la fotólisis del agua para producir hidrógeno y la reducción del  $\text{CO}_2$  para producir combustibles sintéticos (Collings, A. F., & Critchley, C., 2007).

## 8. Metodología

La presente sección describe en detalle los procedimientos experimentales y computacionales empleados en este trabajo de investigación. Se cubrirán las diferentes etapas, abarcando la preparación de muestras, la medición de variables como pH y temperatura, la configuración de la mesa óptica, optimizaciones del análisis computacional y el análisis de error.

El objetivo de esta metodología es establecer un marco reproducible que permita una óptima preparación de muestras y el estudio de  $\text{CO}_2$  en agua mediante patrones de difracción generados por espectroscopía de lente térmica.

### 8.1. Preparación de muestras. Inyección de $\text{CO}_2$ en agua y medición de pH

Para la preparación de muestras se empleó el sistema médico de inyección de  $\text{CO}_2$  CARBOMED, un equipo especializado en la dosificación de este gas de forma controlada y segura. El funcionamiento original del dispositivo involucra el uso de un pedal para la inyección de  $\text{CO}_2$ , sin embargo, para esta investigación se incorporó un módulo de control con Arduino, lo que permitió mayor precisión y estabilidad en la inyección de  $\text{CO}_2$ . A este arreglo experimental se le denominó *sistema de control de flujo de  $\text{CO}_2$* , cuya configuración se detalla a continuación.

El equipo CARBOMED requiere como parámetros de entrada el volumen de  $\text{CO}_2$  a inyectar y el tiempo de inyección, a partir de los cuales se determina el flujo. La integración del módulo de Arduino permitió un control más granular, ya que el gas se administró en forma de “pulsos”, programados en el código de Arduino. En todos los casos la dosis configurada en el CARBOMED se dividió en 10 pulsos, los parámetros que variamos fueron el volumen de  $\text{CO}_2$ , el número de dosis, y el intervalo entre pulsos. Dichas configuraciones se especifican de manera explícita en cada sección de la metodología.

#### 8.1.1. Análisis del efecto del $\text{CO}_2$ en el pH

La primera etapa experimental se centró en estudiar los cambios químicos del agua en presencia de  $\text{CO}_2$ , particularmente las variaciones en el pH de las muestras. Para estas mediciones se utilizó una sonda de pH de BANTE Instruments, instalada en un recipiente de vidrio de 20 mL con la siguiente preparación:

- 10 mL de agua Milli-Q

- 10 cc de CO<sub>2</sub> (g)
- Tiempo entre pulsos: 2 minutos

La inyección del gas se realizó mediante el sistema de control de flujo descrito anteriormente, administrando 10 cc de CO<sub>2</sub> en 10 pulsos, con un tiempo de relajación de 2 minutos entre cada uno.

Medidas de higiene:

- Usar agua mili-q asegurando la pureza y limpieza en los experimentos y cristalería.
- Se realizará un protocolo de limpieza de los contenedores, utilizando solventes, agua y autoclave.

### 8.1.2. Valores de pH con y sin agitado

La metodología de inyección de CO<sub>2</sub> fue la misma para las mediciones con y sin agitador magnético. En ambos casos, el pH se registró cada 10 segundos de manera continua durante la inyección de CO<sub>2</sub>. El agitador magnético se configuró a 350 rpm, y la sonda de pH permaneció sumergida en la muestra, enviando datos a la computadora durante más de 12 horas. La **Error! Reference source not found.** muestra un esquema simple de este sistema de captura de datos.



**Figura 8.1.a** Configuración para la medición de pH.  
Figura creada con BioRender.com

Esta captura automatizada y de evaluación del sistema con la adquisición de datos permitió estudiar la evolución del pH en un periodo extendido de tiempo. Los valores obtenidos se capturaron en la computadora y posteriormente se graficaron mediante MATLAB. Figura creada con BioRender.com

## 8.2. Cálculo de concentración de CO<sub>2</sub> con base en el pH de la muestra

La estimación de la concentración de CO<sub>2</sub> disuelto se realizó mediante un enfoque teórico, empleando los valores de pH experimentales junto con las ecuaciones de equilibrio químico

correspondientes a la disolución de  $\text{CO}_2$  en agua. El desarrollo detallado de este procedimiento se presenta en la sección de Resultados, donde se incluyen los cálculos de concentración molar de  $\text{CO}_2$  a partir de los valores de pH obtenidos experimentalmente.

### 8.3. Primeras mediciones en mesa óptica

#### 8.3.1. Preparación de muestras

La inyección de  $\text{CO}_2$  para la preparación de muestras siguió una metodología similar a la descrita en la sección 8.1. En esta fase, se utilizó un recipiente distinto, una cubeta óptica de cuarzo de 4 ml, sellada y de rosca que soporta los valores de presión trabajados. De igual manera, los volúmenes de  $\text{CO}_2$  (g) y agua Milli-Q fueron diferentes a la sección previa. Las especificaciones empleadas en esta etapa fueron las siguientes:

- Vol. total configurado de  $\text{CO}_2$ : 40 cc
- 2 dosis de 10 pulsos (2 cc por pulso).
- Agua Milli-Q: 1 ml.
- Tiempo entre pulsos: 3 minutos
- Medición continua de presión parcial de  $\text{CO}_2$



**Figura 8.3.a** Ilustración de la preparación de muestras en cubeta óptica expuesta a un láser. Figura creada con BioRender.com

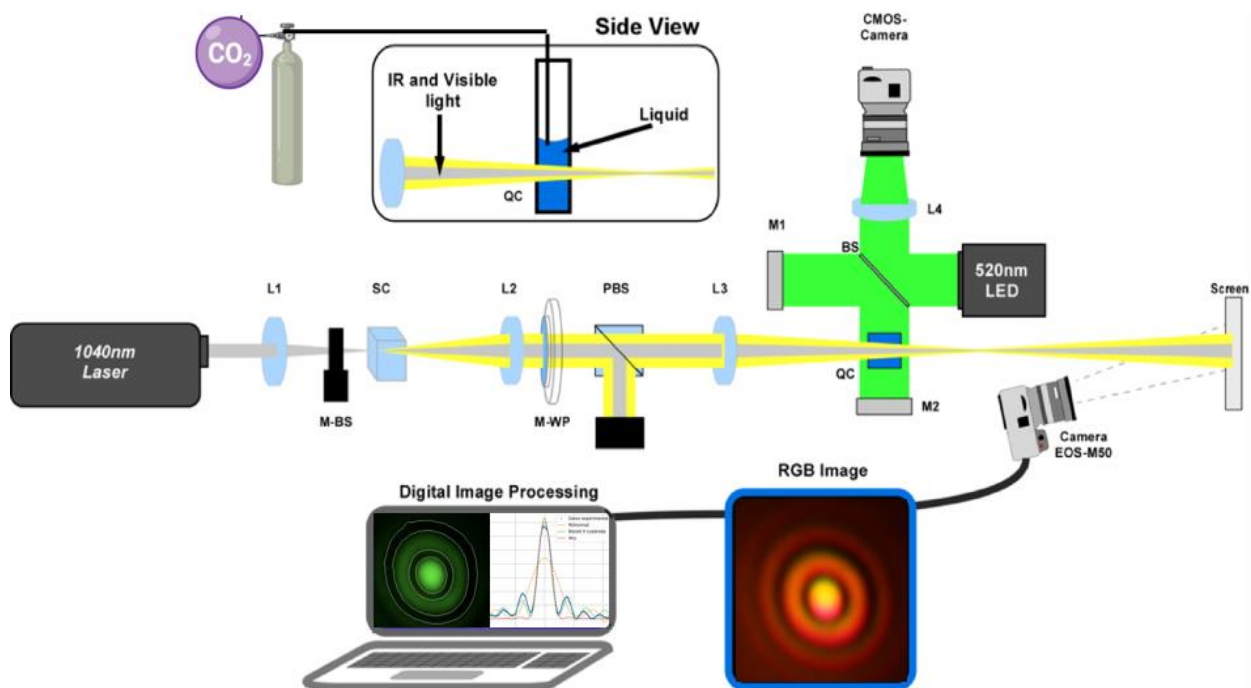
Cabe destacar que la preparación de las muestras no fue un paso independiente previo a la generación y captura de los patrones de difracción; estos procesos se llevaron a cabo de manera simultánea. En lugar de elaborar diferentes soluciones con concentraciones específicas de  $\text{CO}_2$ , se trabajó con una sola muestra inicial de agua con un pH cercano a 7, a la que se inyectaron los pulsos de  $\text{CO}_2$ . Como control de inyección y como referencia, se registró la presión parcial después de la inyección de cada pulso. Este sistema se muestra en la **Figura 8.3.a**.

#### 8.3.2. Generación de patrones de interferencia

Como se indicó en los objetivos e hipótesis, el enfoque principal de esta investigación fue el estudio térmico de las muestras mediante el análisis de patrones de difracción. Para ello se empleó un arreglo experimental de espectroscopía de lente térmica, representado en la

Figura **8.3.b**. Dicho arreglo se basa en un sistema pump-probe que consta de dos láseres: uno infrarrojo de 1040 nm y otro de luz visible, ambos focalizados en una cubeta de cuarzo que contiene la muestra. Como indica el nombre en inglés, pump-probe, cada láser cumple un propósito distinto. En el caso del láser infrarrojo, o láser de bombeo, este es responsable de generar el lente térmico en la muestra. En cambio, el láser de luz visible, o láser de prueba, sirve para visualizar el lente térmico mediante los patrones de interferencia generados.

El sistema tiene control de polarización y de potencia incidente, además de incluir una cámara profesional utilizada para la captura de patrones de interferencia. El arreglo también cuenta con un interferómetro de Michelson para el monitoreo de temperatura, basado en un LED de 520 nm, un conjunto de lentes colimadoras, un *beam splitter* y espejos planos. Los fundamentos y especificaciones técnicas de la configuración óptica empleada en el CFATA se encuentran descritos con mayor detalle en Domínguez-Juárez (2015). No obstante, resulta pertinente destacar el principio de funcionamiento de nuestro sistema, dado que en la sección de resultados se analizarán los efectos de nuestra configuración óptica sobre los patrones obtenidos.



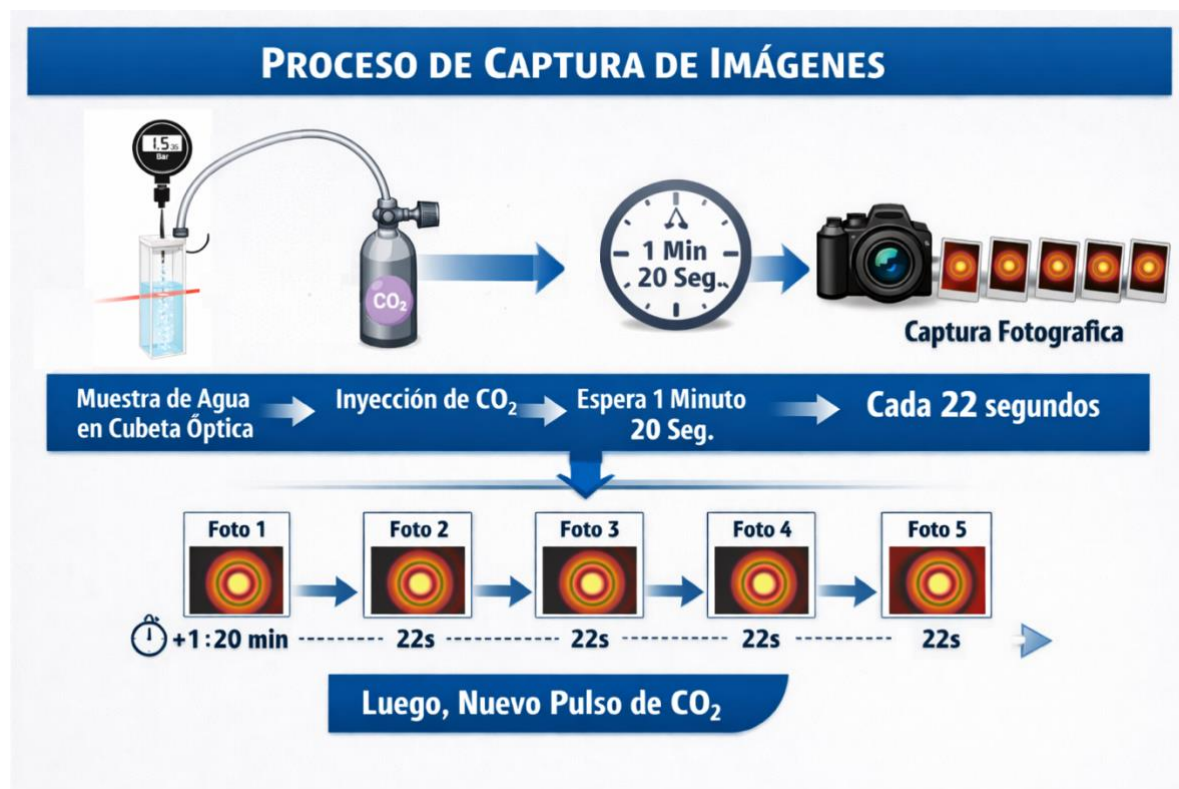
**Figura 8.3.b** Arreglo experimental para espectroscopía de lente térmica. Fuente: elaboración propia.

Para la generación de luz blanca, se empleó un láser infrarrojo que se divide en dos haces: el primero se utiliza para generar el lente térmico, mientras que el segundo atraviesa un zafiro, el cual genera

luz blanca que incide en la muestra y da lugar al patrón de interferencia capturado (Valdés et al., 2022).

### 8.3.3. Captura de patrones de difracción

Como se mencionó previamente, la preparación de muestras y la captura de patrones de difracción se realizaron de manera conjunta. Para cada uno de los 20 pulsos de  $\text{CO}_2$  inyectados se capturaron 5 fotografías del patrón de difracción correspondiente. Con el objetivo de visualizar de manera clara el procedimiento, se generó el diagrama presentado en la *Figura 8.3.c*.



**Figura 8.3.c** Diagrama del proceso experimental para la generación y captura de patrones de difracción. Figura con ayuda de IA.

El diagrama muestra el proceso de adquisición de imágenes, con una duración total de tres minutos, realizado para cada pulso de  $\text{CO}_2$  inyectado. El procedimiento comienza con la inyección de  $\text{CO}_2$ , seguida de un tiempo de espera de 1 minuto con 20 segundos, tras el cual se realiza la primera captura del patrón de difracción.

Después de la primera imagen se capturan cuatro fotografías adicionales, para un total de cinco imágenes por pulso. Estas se toman de forma consecutiva con un intervalo de aproximadamente 22 segundos entre cada una. Tomando la inyección del gas como tiempo inicial (0:00), las imágenes se registran en los siguientes tiempos: 1:20, 1:42, 2:04, 2:26 y 2:48.

Aunque las fotografías están programadas para tomarse cada 20 segundos, la captura de fotografía toma aproximadamente 2 segundos, lo que resulta en un intervalo efectivo cercano a los 22 segundos entre cada imagen. Finalmente, este proceso automatizado se repite para el total de 20 pulsos de  $\text{CO}_2$ .

## **8.4. Análisis computacional**

### **8.4.1. Repositorio para el análisis de patrones de difracción**

Con el propósito de que el código desarrollado en esta tesis pueda servir como referencia y herramienta para futuros trabajos de investigación relacionados con el estudio de patrones de difracción, se pone a disposición el repositorio correspondiente. En él se incluye el código empleado para el análisis computacional, así como un archivo README que detalla las instrucciones para su correcta utilización.

[https://github.com/RReyesSaavedra/diffraction\\_pattern\\_analysis](https://github.com/RReyesSaavedra/diffraction_pattern_analysis)

En las siguientes secciones se describen el enfoque general y los principios físicos que sustentan cada etapa del análisis computacional. La explicación del código y aspectos de programación se aborda únicamente de manera superficial, ya que el interés principal de esta investigación recae en la interpretación física de los resultados más que en los detalles técnicos de implementación.

### **8.4.2. Análisis de áreas luminosas**

Parte del análisis computacional involucra la detección de contornos del patrón de difracción. Para poder calcular el área de las regiones luminosas con precisión es indispensable que los contornos obtenidos limiten de manera correcta los anillos del patrón de difracción.

Es con este objetivo que se realizó un preprocesamiento de imágenes, que consiste en una serie de operaciones diseñadas para optimizar la definición de los anillos de difracción y remover ruido de la imagen. En primer lugar, se filtró un solo canal RGB y se realizó la conversión a escala de grises, para evitar el solapamiento de patrones y simplificar la información cromática. Posteriormente, se

aplicó una ecualización del histograma para mejorar el contraste global de la imagen, seguida de un filtrado Gaussiano que permitió reducir el ruido de alta frecuencia y suavizar los bordes. A continuación, se implementó una umbralización adaptativa mediante el método de la media (adaptive mean thresholding), la cual resultó eficaz para segmentar las regiones luminosas incluso en condiciones de iluminación no uniforme. Finalmente, se aplicaron operaciones morfológicas de dilatación y erosión, con el propósito de refinar los bordes detectados y garantizar la continuidad de los anillos de difracción.

Completada la etapa de preprocesamiento de imágenes, se procedió con la detección de contornos, para esto se utilizó la librería cv2.findContours, la cual genera un arreglo de coordenadas que representa el contorno. A partir de esto realizamos el filtrado en función de la circularidad de los contornos (umbral mínimo de 0.7) y área (mínimo de 3000 píxeles), con el propósito de eliminar ruido y estructuras irrelevantes. El número de contornos seleccionados fue definido a partir del número de anillos luminosos que se podían distinguir claramente en las imágenes obtenidas.

Finalmente, el área se calculó a través de restar las áreas oscuras del área del contorno más externo del último anillo luminoso. Estos valores de área se graficaron en función del número de pulsos de CO<sub>2</sub> en la muestra, con el objetivo de establecer una tendencia conforme aumenta la concentración de CO<sub>2</sub>.

#### 8.4.3. Ajuste de función Bessel orden cero

El segundo método empleado para el análisis de los patrones está más enfocado en la interpretación física, utilizando funciones comúnmente empleadas en el ámbito de la óptica y la teoría de difracción. Estas funciones constituyen una aproximación adecuada para describir los perfiles de intensidad observados en los patrones experimentales.

Para obtener dichos perfiles de intensidad, se extrajo un renglón de la matriz que compone la imagen. El renglón seleccionado corresponde al centroide del círculo central, previamente obtenido mediante la metodología de análisis de áreas. Formalmente, la intensidad a lo largo del eje x se define como:

$$I(x) = M(x, y_0) \quad (\text{Ecuación 8.1})$$

donde  $y_0$  es la coordenada vertical del centroide del patrón.

Para el ajuste de datos se implementó un ajuste no lineal en Python. El cual se realizó mediante el método `curve_fit` de SciPy, optimizando los parámetros de cada modelo minimizando la diferencia cuadrática entre los datos experimentales y las funciones teóricas propuestas.

Se exploraron tres funciones distintas, basadas en fundamentos ópticos y empíricos:

### 1. Función de Bessel

La función de Bessel de primer tipo y orden cero describe la distribución de intensidad esperada en patrones de difracción con simetría circular. El modelo utilizado fue:

$$I(x) = a[J_0(f \cdot x)]^2 + c \quad (\text{Ecuación 8.2})$$

donde  $a$  es la amplitud,  $f$  la frecuencia espacial asociada al espaciamiento entre anillos, y  $c$  un término de desplazamiento de base.

### 2. Función de Airy

Basada en la teoría de difracción de Fraunhofer para aperturas circulares, esta función modela la intensidad del patrón de Airy mediante:

$$I(r) = I_0 \left[ \frac{2 J_1(\beta r)}{\beta r} \right]^2 \quad (\text{Ecuación 8.3})$$

donde  $I_0$  representa la intensidad máxima en el centro y  $\beta$  un parámetro proporcional al número de anillos y al tamaño efectivo de la apertura.

### 3. Función polinomial par

Como referencia empírica, se consideró una función polinomial de grado par, que permite describir variaciones suaves de intensidad sin imponer una forma física específica:

$$I(x) = \sum c_i x^{2i} \quad (\text{Ecuación 8.4})$$

donde  $c_i$  son los coeficientes ajustables del polinomio.

Cada una de estas funciones se ajustó a los perfiles de intensidad promediados obtenidos a partir de las imágenes procesadas, con el objetivo de comparar su capacidad descriptiva y evaluar cuál

reproduce con mayor fidelidad la forma experimental de los patrones observados. La comparación de la calidad de ajuste entre los modelos se presenta en la sección de resultados.

## 8.5. Análisis de error

Para el análisis de error se calculó la desviación estándar de cada muestra. Como se mencionó previamente, para cada patrón se capturaban 5 imágenes. Sin embargo, como se explicará en la sección de resultados, solo se consideraron las últimas 2 imágenes para el cálculo de error. Aun con este número limitado de datos, se realizó el cálculo para obtener un acercamiento a las variaciones que existen en nuestro sistema. Este procedimiento se realizó tanto para el análisis de áreas luminosas como para el ajuste de la función de Bessel.

## 8.6. Cálculo de concentraciones en función del valor de $p\text{CO}_2$ medido

Para estimar las concentraciones de las especies químicas presentes en el sistema carbonato en solución acuosa, se emplearon las ecuaciones de equilibrio correspondientes a las reacciones de acidificación del  $\text{CO}_2$  en agua, así como la ley de Henry, presentadas previamente en el marco teórico.

A partir de este conjunto de ecuaciones y de los valores experimentales de presión parcial de  $\text{CO}_2$  ( $p\text{CO}_2$ ) medidos durante la captura de patrones de difracción, se calcularon las concentraciones de las diferentes especies del sistema carbonato, incluyendo  $\text{CO}_2$  disuelto ( $\text{CO}_2(\text{aq})$ ), ácido carbónico ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ), bicarbonato ( $\text{HCO}_3^-$ ) y carbonato ( $\text{CO}_3^{2-}$ ).

El desarrollo matemático del sistema de ecuaciones utilizado para determinar estas concentraciones se presenta en la sección de resultados.

## 8.7. Instrumentación de la máquina de inyección CARBOMED

Como medición adicional y de verificación de funcionamiento, se incluyó en la sección de anexos un estudio del volumen inyectado por el sistema CARBOMED. Este fue un paso previo a la automatización y generación de información de esta tesis, es decir previo a las medidas sistemáticas.

Esta prueba sencilla consiste en un estudio del volumen inyectado a un contenedor por el sistema CARBOMED en función de la presión presente en la punta de la aguja de inyección. No solo sirve para verificar la purga del sistema, sino que permite analizar la variación del volumen de  $\text{CO}_2$  expulsado bajo diferentes condiciones de presión. El objetivo fue obtener una estimación preliminar

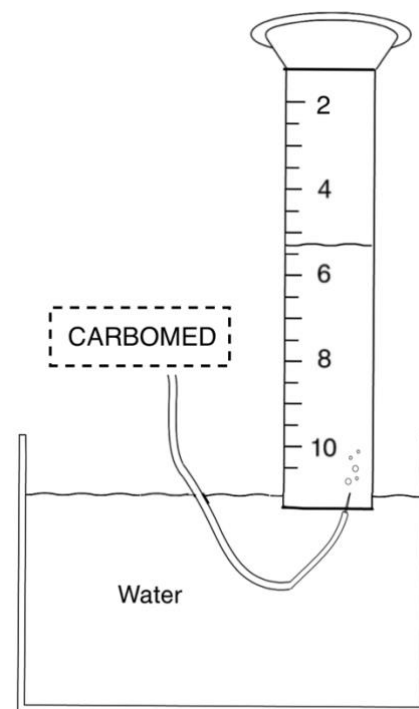
de la relación entre la presión enfrentada por el sistema y el volumen efectivamente inyectado. Con este propósito, se diseñó un experimento sencillo basado en la ecuación de presión hidrostática:

$$P = \rho gh$$

El montaje experimental consistió en colocar una probeta boca abajo, sumergida dentro de un recipiente con agua. De esta manera, la probeta contenía una mezcla de aire y agua, y al inyectar gas en su interior, el CO<sub>2</sub> desplazaba el agua en lugar de escapar. Este comportamiento se debe a que, de acuerdo con el principio de Pascal, la presión dentro de la probeta tiende a igualarse con la presión atmosférica que actúa sobre la superficie del agua. La *Figura 8.7.8.7.a* ilustra el montaje utilizado.

Durante la inyección de CO<sub>2</sub> la cantidad de agua dentro de la probeta disminuye, reduciendo la altura de la columna de agua sobre la jeringa, lo que a su vez afectaba la presión, tal como se describe en la ecuación de presión hidrostática. Considerando que la densidad del agua es aproximadamente 1 g/cm<sup>3</sup> (equivalente a 1 ml/cm<sup>3</sup>), bastaba con observar cuántos mililitros de agua eran desplazados para conocer el volumen de gas inyectado. La presión correspondiente se calculó sustituyendo los valores adecuados en la fórmula.

Para la inyección de CO<sub>2</sub> se inyectaron múltiples de pulsos de 2cc cada uno. El procedimiento se llevó a cabo utilizando dos probetas de distinto tamaño, con el propósito de simular diferentes condiciones de presión. Los valores de volumen desplazado fueron determinados de forma visual, tomando como referencia las marcas graduadas de las probetas.



**Figura 8.7.8.7.a** Montaje experimental para medir el volumen de CO<sub>2</sub> inyectado.

## 9. Recursos

En esta sección se listan los materiales e instrumentos utilizados en la investigación, junto con una breve descripción de cada uno. Empezando con el sistema de inyección automatizado generado en combinación con el dispositivo CARBOMED para preparar las muestras con CO<sub>2</sub>. La máquina utilizada tiene las siguientes especificaciones:

| <b>Detalles técnicos sistema de inyección</b> |                                                                                                  |
|-----------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Alimentación                                  | 115/230 Vca - 50/60 Hz                                                                           |
| Potencia máxima absorbida                     | 80 VA                                                                                            |
| Fusibles                                      | (230 Vca) 2 x 2 AT / (115 Vca) 2 x 4 AT                                                          |
| Presión del gas CO <sub>2</sub> de entrada    | 3,0 bar $\pm$ 0,5 bar (300 kPa $\pm$ 50 kPa)                                                     |
| Flujo suministrable                           | de 10 ml/min a 150 ml/min                                                                        |
| Tiempo de tratamiento                         | de 1 a 99 minutos                                                                                |
| Indicación del volumen suministrado           | de 10 ml a 14.850 ml                                                                             |
| Sistema arduino de pulsos                     | Control digital de inyección limitado por la función delay de Arduino, precisión de milisegundos |

**Tabla 9.a** Detalles técnicos del dispositivo de inyección de CO<sub>2</sub>

Para la captura de valores de pH se utilizó la sonda de pH (*Bante220 Portable PH Meter - Bante Instruments*, n.d.) la cual presenta las siguientes características relevantes:

| <b>Detalles Técnicos sonda de pH (Bante220)</b> |                                                                                                              |
|-------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Rango de medición de pH                         | -2,00 a 20,00 pH                                                                                             |
| Resolución                                      | 0,01 pH                                                                                                      |
| Precisión                                       | $\pm$ 0,01 pH                                                                                                |
| Calibración                                     | De 1 a 3 puntos; reconocimiento automático de tampones USA (4,01 / 7,00 / 10,01) o NIST (4,01 / 6,86 / 9,18) |
| Compensación de temperatura                     | Automática o manual, de 0 a 100 °C                                                                           |

| <b>Detalles Técnicos sonda de pH (Bante220)</b> |                                                  |
|-------------------------------------------------|--------------------------------------------------|
| Comunicación                                    | Puerto USB para registro de datos en tiempo real |
| Intervalo de tiempo mínimo                      | Cada 10 segundos                                 |

**Tabla 9.b** Detalles técnicos de la sonda de pH Bante220

Los instrumentos y materiales utilizados en el montaje experimental incluyen un conjunto de lentes colimadoras, un beam splitter, espejos planos, un sustrato de zafiro y otros componentes ópticos. La lista completa de estos elementos, así como una descripción más detallada de su función dentro del sistema experimental, puede consultarse en Domínguez-Juárez (2015).

En cuanto a la preparación de las muestras, únicamente se requirieron dos materiales: agua y CO<sub>2</sub>. Con el objetivo de trabajar con un pH constante, lo más cercano posible a 7, se utilizó agua ultrapura Milli-Q. Para la inyección de CO<sub>2</sub> se empleó un tanque de gas ultrapuro de la marca Criogas. El dióxido de carbono utilizado corresponde a CO<sub>2</sub> extra seco con una pureza del 99.8 %.

Para la captura de imágenes se utilizó una cámara Canon EOS-M50. El procesamiento de imágenes realizado en esta investigación no requirió una alta demanda computacional, por lo que fue suficiente el uso de computadoras personales. El análisis de datos y el procesamiento de las imágenes se realizaron utilizando el lenguaje de programación Python; el código completo empleado en este trabajo se presenta en la sección de anexos.

## 10. Alcance del proyecto

En primera instancia, este trabajo se enfoca en el entendimiento de los efectos químicos y termo-ópticos del  $\text{CO}_2$  disuelto en muestras de agua y cómo estos influyen en la intensidad del lente térmico. Paralelamente, se trabajó en la optimización del sistema automatizado de inyección de  $\text{CO}_2$ , así como en la generación y captura de los patrones de difracción, buscando mejorar la estabilidad y repetitividad de las mediciones.

Posteriormente, se estudió el cambio en la intensidad del lente térmico al modificar la concentración de  $\text{CO}_2(\text{g})$ , con el objetivo de determinar si existe una diferencia significativa entre los patrones obtenidos para cada muestra. Si bien se logró detectar una diferencia estadísticamente significativa entre muestras, con esta primera aproximación no se establece una relación funcional directa entre la concentración de  $\text{CO}_2$  y las características del patrón de difracción. Para ello sería necesario trabajar con un mayor rango de concentraciones y/o contar con una técnica con mayor sensibilidad como se indica en el apartado de trabajo futuro.

Es importante señalar no se varió la longitud de onda del láser infrarrojo ni la temperatura inicial de la muestra, trabajando siempre bajo condiciones estándar. Tampoco se utilizó el video capturado por el interferómetro, el cual permitía monitorear la temperatura dinámica de la muestra durante la inyección de  $\text{CO}_2$ . El análisis de estas variables podrían influir en la respuesta termo-óptica del sistema, pero quedan fuera del alcance del presente estudio.

## 11. Resultados

El desarrollo de esta investigación nos proporcionó experiencia en la manipulación de gases disueltos en líquidos. Se confirmó experimentalmente una disminución en el pH de las muestras líquidas a medida que aumentamos la concentración de  $\text{CO}_2$ . De igual manera se identificó la configuración ideal para maximizar la concentración de  $\text{CO}_2$  disuelto. Se observó el tiempo de atrapamiento del  $\text{CO}_2$  en el líquido y el tiempo de liberación natural en un sistema abierto.

Una vez completado el estudio químico y físico de las muestras, se continuó con las mediciones en la mesa óptica; generando un lente térmico de la muestra para la obtención de los patrones de difracción. El análisis computacional reveló diferencias significativas entre los patrones de difracción de la muestra de agua y los correspondientes a la muestra con mayor concentración de  $\text{CO}_2$ . También se utilizó la presión parcial de  $\text{CO}_2$  medida para el cálculo de concentraciones de compuestos y se observó un comportamiento no lineal en los cambios de presión. A continuación, se presentan a detalle los resultados obtenidos, que abren la puerta a mejoras en la detección de  $\text{CO}_2$  con espectroscopia de lente térmica con el sistema automatizado de inyección implementado.

### 11.1. Análisis de los efectos de disolución de $\text{CO}_2$ en agua

Primer estudio químico y físico de la muestra, se prepararon muestras de agua en las que se incrementó la concentración de  $\text{CO}_2$  periódicamente con la inyección de centímetros cúbicos de gas. Los detalles y parámetros configurados para esta etapa se encuentran en la metodología del análisis del efecto del  $\text{CO}_2$  en el pH. Los puntos destacables son el uso de un vaso de precipitados de 20 mililitros, la medición continua del pH y el uso de un recipiente no sellado permitiendo el escape de  $\text{CO}_2$  (g). Los parámetros configurados se encuentran en la metodología del análisis del efecto del  $\text{CO}_2$  en el pH.

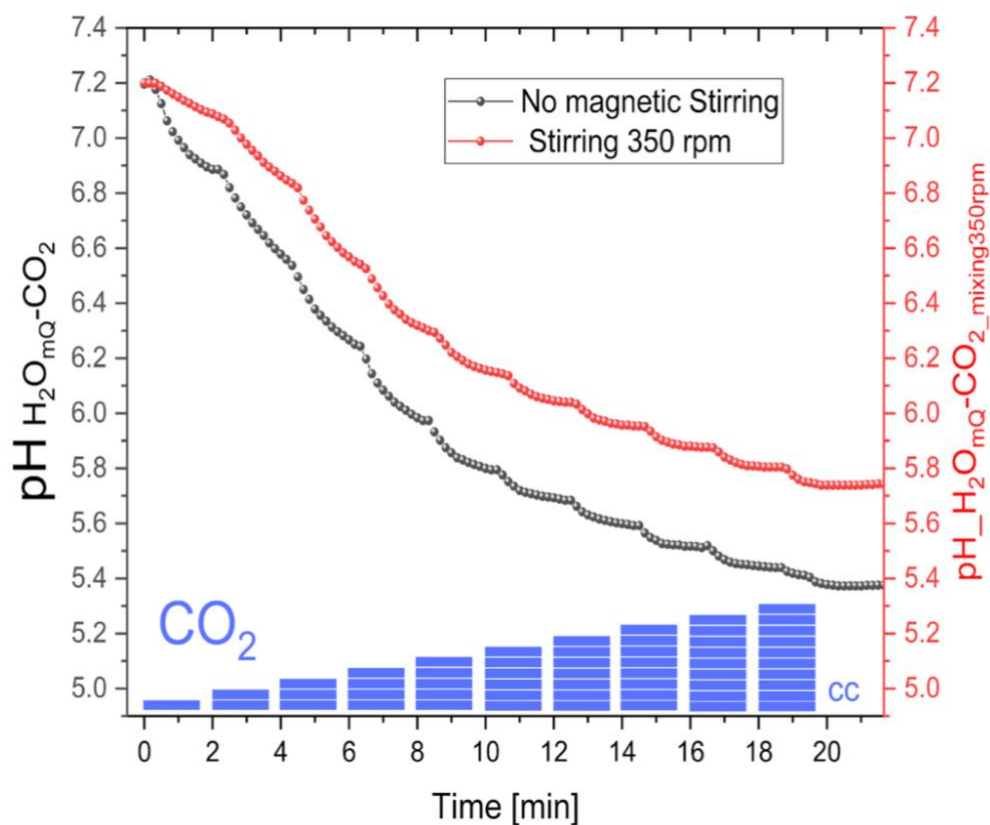
#### 11.1.1. Comparación de mezclas con y sin agitador magnético

Las primeras mediciones con la sonda BANTE nos permitieron visualizar claramente la velocidad de cambio del pH del agua ante la presencia de  $\text{CO}_2$ . De igual manera, a partir de los datos obtenidos es posible calcular una aproximación de la cantidad de  $\text{CO}_2$  disuelto en agua y su estabilidad en el tiempo, como se mostrará más adelante en esta sección.

En primera instancia, se observó que a los dos minutos de la inyección de un pulso, los dos centímetros cúbicos de  $\text{CO}_2$  (g) se estabilizan. Esto es evidenciado por el cambio monótono de pH

hasta alcanzar un valor fijo. El comportamiento es propiciado por la velocidad de difusión del  $\text{CO}_2$  en el agua y el tiempo de respuesta de la sonda de pH.

Al comparar gráficamente los resultados entre el uso y la ausencia de un agitador magnético, notamos dos comportamientos claros en sistemas abiertos, como lo es el contenedor de vidrio que utilizamos. Observamos que al usar un agitador magnético, el cambio de pH inducido disminuye en comparación con las muestras preparadas sin agitador. En ambas configuraciones hay un cambio mayor del pH en las primeras inyecciones de  $\text{CO}_2$  y al continuar inyectando la misma cantidad de gas por pulso, el efecto es menor en la escala logarítmica. No obstante, al analizar los datos en escala lineal (concentración de  $\text{H}^+$ ), se observa que cada dos centímetros cúbicos de gas inyectados aportan el mismo número de  $\text{H}^+$  en el proceso de acidificación



**Figura 11.1.a** pH de la muestra con agitador vs sin agitador

Las diferencias entre configuraciones y el comportamiento logarítmico se pueden observar en la **Figura 11.1.a**. Específicamente, en la medición con agitador, el pH alcanzó un valor mínimo de 5.76, mientras que sin agitador descendió hasta 5.39. Esto se debe a que el movimiento generado por el

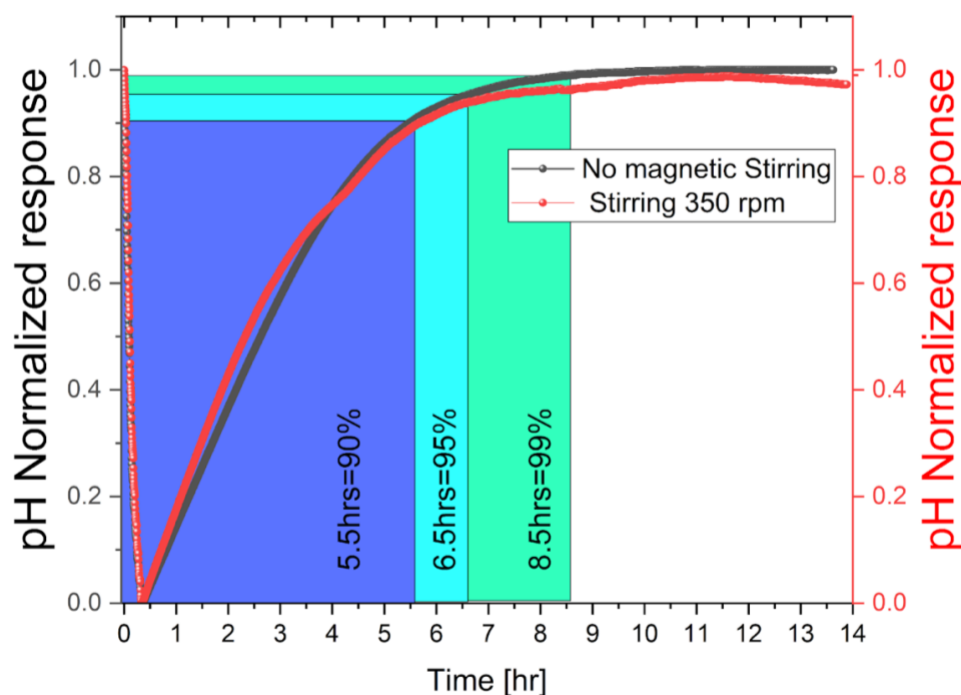
agitador expulsa hacia la superficie parte del  $\text{CO}_2$  inyectado, reduciendo el tiempo de contacto entre el gas y el agua y, en consecuencia, disminuyendo la cantidad de  $\text{CO}_2$  disuelto.

Otra observación interesante es que el uso del agitador suaviza la curva de pH. Además, en ambos casos, se puede comprobar que los primeros pulsos generan el mayor cambio en el pH, mientras que los pulsos posteriores tienen un efecto progresivamente menor debido a la escala logarítmica.

A partir de estos resultados, se concluye que, existe la posibilidad de usar el agitador magnetico en sistemas abiertos cuyo objetivo es maximizar la disolución de  $\text{CO}_2$ . Además, se comprobó que conservar el gas en el líquido un mayor tiempo y tener un tamaño de burbuja menor, nos permite llevar la muestra a valores de pH más bajos.

### 11.1.2. Estudio de escape de $\text{CO}_2$ disuelto en $\text{H}_2\text{O}$

Al medir el valor de pH en una ventana de tiempo más amplia, pudimos observar la liberación de  $\text{CO}_2$  disuelto. Este proceso constituye la reacción de reversión de disolución de  $\text{CO}_2$  presentada en el marco teórico y ocurre mediante el escape de gas de dióxido de carbono de la muestra.



**Figura 11.1.b** Medición de pH durante la reacción de reversión.

En la **Figura 11.1.b** se observa que aproximadamente el 90 % del  $\text{CO}_2$  se ha liberado después de 5 horas y media, el 95 % tras 6 horas y media, y cerca del 100 % al cabo de 8 horas y media. En

intervalos de tiempo cortos del orden de minutos, como los primeros 20 minutos de inyección, puede ignorarse el escape del CO<sub>2</sub> gaseoso, sin embargo, en periodos más largos existe una dinámica que debe considerarse entre inyección y liberación del gas.

Estos resultados indican que, en cierta medida, es posible controlar el pH de la muestra, ya sea mediante la inyección de CO<sub>2</sub> o con la reacción de reversión. Esto abre la puerta al ajuste automatizado de pH con un sistema de control basado en el mismo que se utiliza en esta sección. Esto permitiría tener valores de pH fijos o variables a lo largo del tiempo en un sistema abierto como se muestra en las figuras anteriores.

## 11.2. Cálculo de concentración de CO<sub>2</sub> con base en el pH de la muestra

Con el objetivo de obtener más información sobre nuestras mediciones, se realizó una primera aproximación de la concentración de CO<sub>2</sub> en el tiempo de la muestra, utilizando los valores de pH medidos. Para establecer la relación entre el pH y la concentración de CO<sub>2</sub>, se debe considerar el proceso de disolución del CO<sub>2</sub> en agua y la definición química del pH. Las constantes de equilibrio utilizadas en los cálculos presentados se extrajeron de libros y artículos especializados (Atkins & de Paula, 2014; Stumm & Morgan, 1996; Sander, 2023). A continuación se presentan las reacciones involucradas y el desarrollo realizado para obtener la expresión que necesitamos.

Ecuación de equilibrio de hidratación del CO<sub>2</sub>:



Ecuación de equilibrio químico para la primera disociación del ácido carbónico:



Relacionando estas ecuaciones con sus constantes de equilibrio obtenemos las siguientes dos ecuaciones, para la hidratación de CO<sub>2</sub>:

$$K_{\text{hid}} = \frac{[\text{H}_2\text{CO}_3]}{[\text{CO}_2(\text{aq})]} \quad (\text{Ecuación 11.3})$$

Para la primera disociación del ácido carbónico, originalmente la ecuación es:

$$k_{a1} = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]} \quad (\text{Ecuación 11.4})$$

Considerando que existe una relación 1:1 entre los productos, es decir que los hidrógenos del  $H_2CO_3$  se dividen entre ambos productos de igual manera ( $[H^+] = [HCO_3^-]$ ) se puede hacer la siguiente simplificación:

$$k_{a1} = \frac{[H^+]^2}{[H_2CO_3]} \quad (\text{Ecuación 11.5})$$

Combinemos la ecuación 11.3 y 11.5 para obtener la relación entre el pH y  $[CO_2]$

$$[H^+]^2 = k_{a1} \cdot [H_2CO_3] = k_{a1} \cdot K_{hid} \cdot [CO_2(aq)]$$

$$[CO_2(aq)] = \frac{[H^+]^2}{k_{a1} \cdot K_{hid}} \quad (\text{Ecuación 11.6})$$

Utilizando la definición de pH:

$$pH = -\log_{10} [H^+] \rightarrow [H^+] = 10^{-pH} \rightarrow [H^+]^2 = 10^{-2pH} \quad (\text{Ecuación 11.7})$$

Finalmente, al sustituir obtendremos una expresión que relaciona el pH de la muestra con la concentración de  $CO_2$  de la misma.

$$[CO_2(aq)] = \frac{10^{-2pH}}{k_{a1} \cdot K_{hid}} \quad (\text{Ecuación 11.8})$$

A partir del valor más bajo de pH registrado (5.39), se calculó una concentración máxima de  $CO_2$  disuelto de 0.023 mol/L. Este valor establece una escala de referencia para el análisis óptico posterior. En comparación con estudios previos realizados en el laboratorio de óptica del CFATA, observar diferencias en este rango de concentraciones, representa una mejora en el rango de detección en 2 ordenes de magnitud, sin cambios en el sistema espectroscópico.

En trabajos anteriores sin análisis computacional, empleando muestras de NaCl en el rango de 0.175 M a 3 M, las diferencias en los patrones de difracción eran lo suficientemente marcadas para observarse de forma directa. En contraste, las condiciones de este estudio demandan un análisis computacional más sensible, capaz de identificar variaciones marginales entre los patrones de difracción. Para tal fin, se desarrolló y optimizó un código especializado, incorporando distintos enfoques y metodologías orientados a mejorar la resolución del análisis.

En la siguiente sección se presentan los patrones de difracción obtenidos y las técnicas aplicadas para su procesamiento.

### 11.3. Generación de patrones de difracción y preprocesamiento de imágenes

En esta etapa se utilizó la mesa óptica para generar los patrones de difracción, siguiendo la metodología descrita previamente. Los resultados mostrados en esta sección presentan el inicio del estudio termo-óptico de las muestras y cubren la inyección de  $\text{CO}_2$ , la obtención de los patrones de difracción y el procesamiento previo al análisis computacional. Observamos la muestra preparada para la mesa óptica, el preprocesamiento de imágenes, descomponiéndolas en sus tres canales RGB para determinar la información que contiene cada uno. También se incluyen patrones de difracción obtenidos para visualizar sus elementos y propiedades.

#### 11.3.1. Inyección de $\text{CO}_2$ y obtención de patrones de difracción

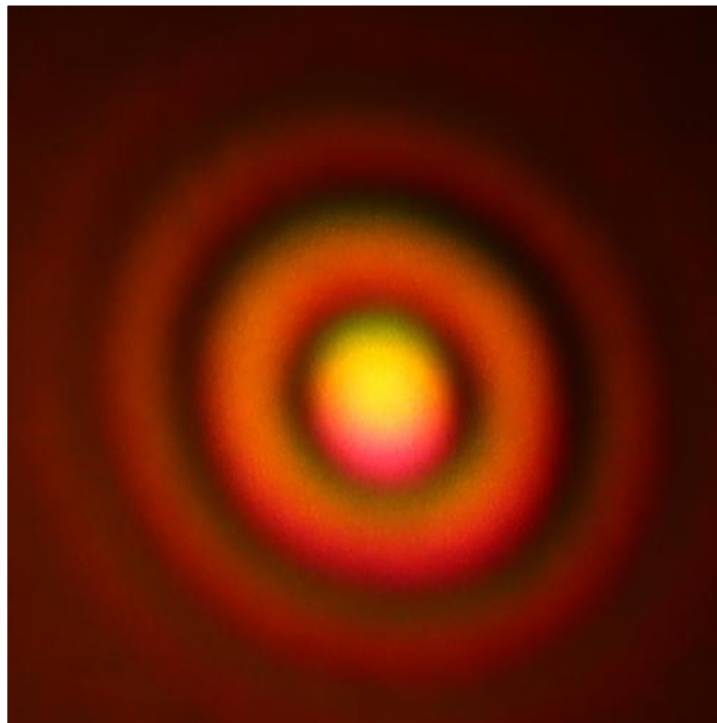
Con el objetivo de mostrar más claramente el proceso de inyección, se tomó una fotografía de la cubeta óptica fuera de la mesa óptica, esta imagen se muestra en la *Figura 11.3.a*. Para la generación del lente térmico, la cubeta permaneció en la mesa óptica durante el proceso de inyección de  $\text{CO}_2$ . Otro detalle notable de fotografía es que el contenedor es hermético y hace un buen trabajo en sellar la muestra, evitando fugas de  $\text{CO}_2$  (g). Aunque no aparece en la imagen, también se utilizó un medidor de presión con el objetivo de llevar una medida de control. Con esta configuración se obtuvieron imágenes de los patrones de difracción de la muestra a medida que se inyectaba cada pulso de  $\text{CO}_2$ .



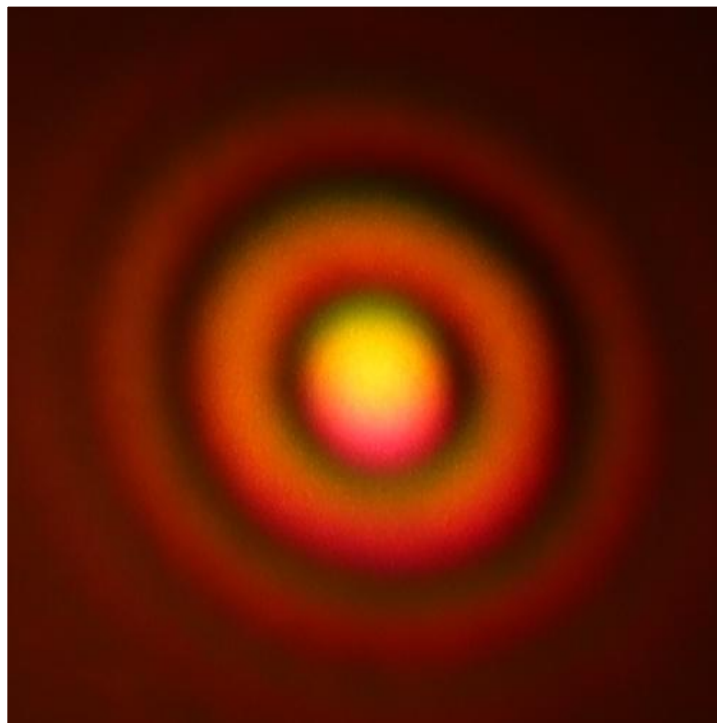
**Figura 11.3.a** Fotografía del sistema de inyección de  $\text{CO}_2$

#### 11.3.2. Preprocesamiento de Imágenes

Las imágenes originales tienen una resolución de 4k. Previo a realizar el análisis computacional, las imágenes son centradas al punto de mayor intensidad del patrón de difracción y recortadas a un octavo de su tamaño. A continuación se muestran los patrones originales antes de su procesamiento, que nos permiten visualizar la información de la que partió nuestro análisis. A la izquierda se muestra el patrón correspondiente al agua mili-q; a la derecha, el patrón de la muestra con mayor concentración de  $\text{CO}_2$ .



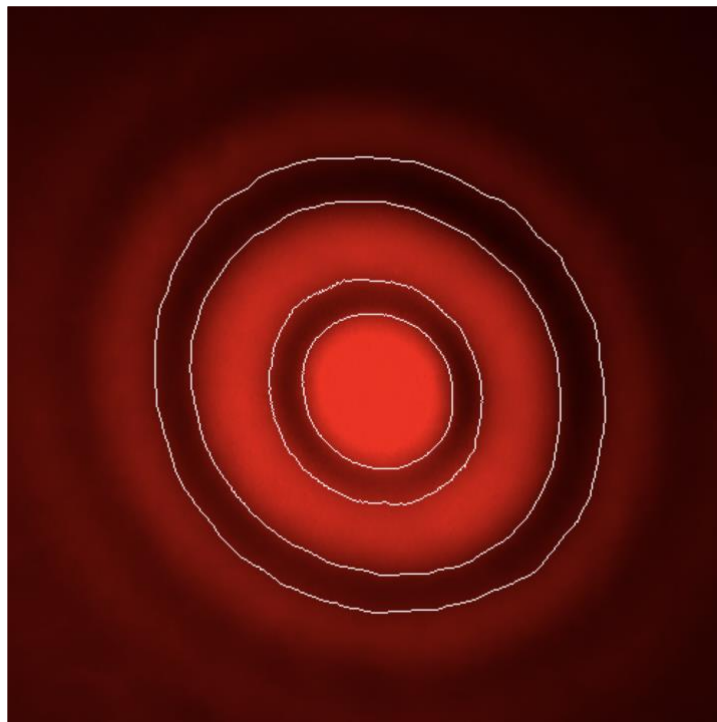
**Figura 11.3.b** Patrón de difracción del agua como referencia.



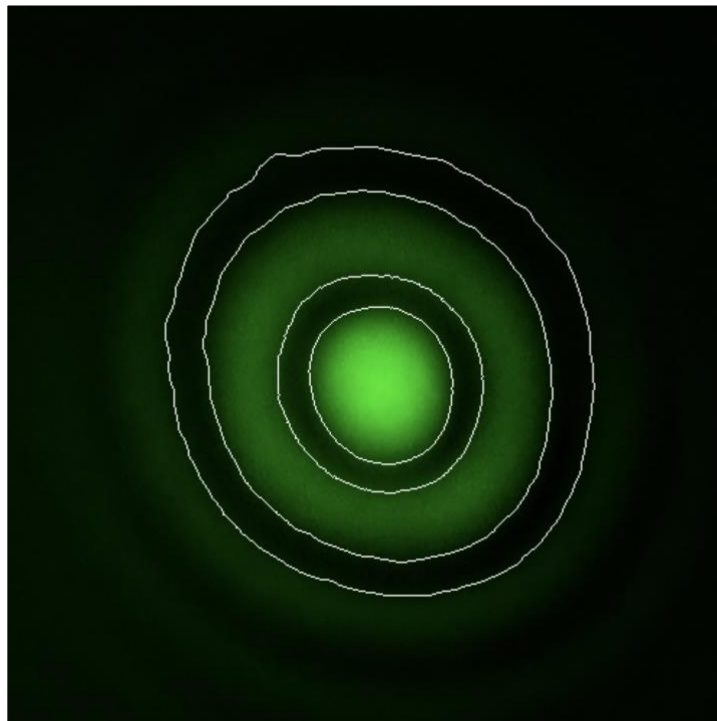
**Figura 11.3.c** Patrón de difracción de muestra con mayor concentración de  $\text{CO}_2$ .

Como se puede observar en las siguientes figuras, a simple vista resulta difícil notar diferencias entre los patrones de difracción. Sin embargo, el análisis computacional de estos patrones permite detectar y cuantificar variaciones mediante métodos como el análisis de áreas y el ajuste de funciones de Bessel. Para realizar este análisis se exploraron distintos enfoques, entre ellos el conteo de anillos en el patrón de difracción, la integración del perfil de intensidad a lo largo del eje x, el análisis de áreas y el ajuste de funciones al perfil de intensidad.

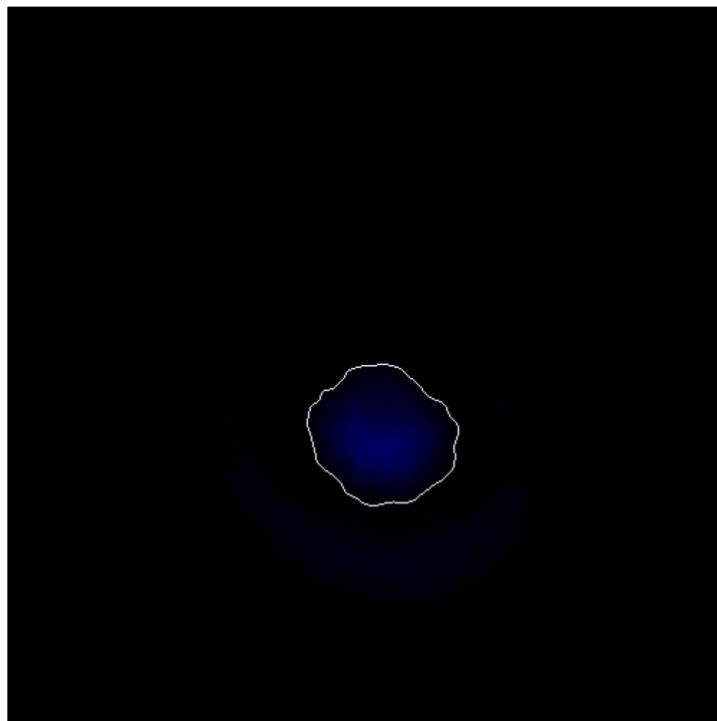
Finalmente, dos metodologías mostraron mayor precisión y diferencia entre muestras: (i) el análisis de áreas luminosas y (ii) el ajuste de una función de Bessel de orden cero al perfil de intensidad. Ambos procedimientos se describen con detalle en secciones posteriores. Antes de ello, observemos los diferentes canales de color RGB que componen nuestras imágenes.



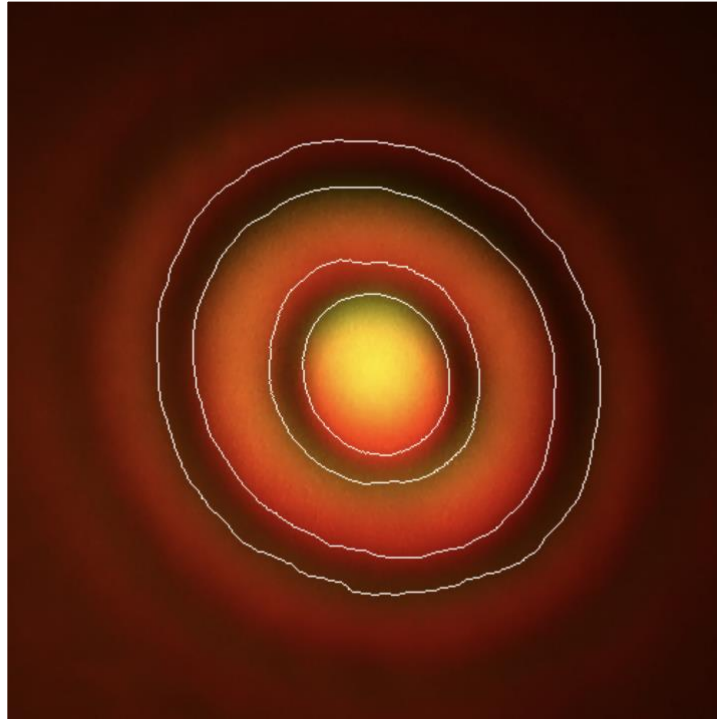
**Figura 11.3.d** Canal rojo del patrón de difracción



**Figura 11.3.e** Canal verde del patrón de difracción.



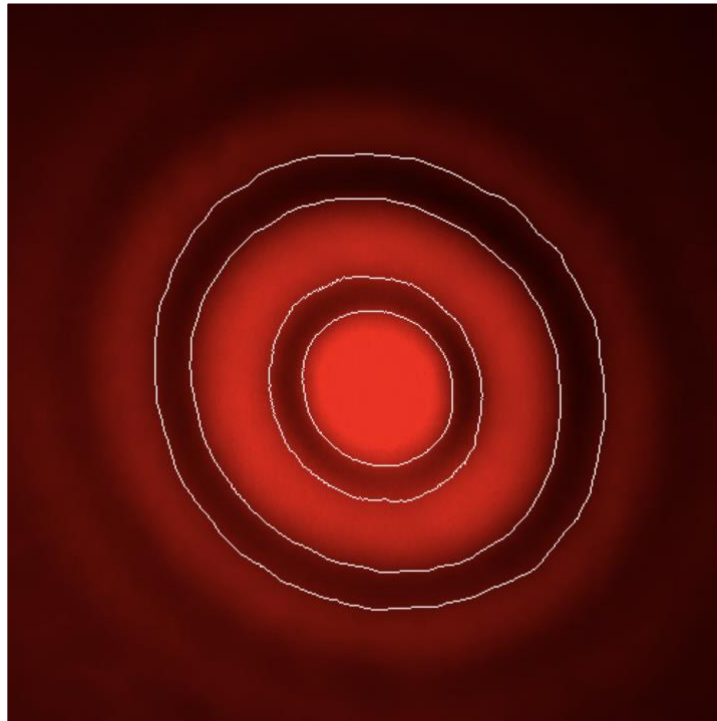
**Figura 11.3.f** Canal azul del patrón de difracción



**Figura 11.3.g** Combinación de Canal R y G

Para optimizar nuestro análisis computacional fue de gran utilidad usar la estructura de la imagen del patrón de difracción obtenido con la cámara comercial, es decir a partir de los tres canales RGB de cada imagen (R-Red, G-Green, B-Blue). Donde cada canal tienen 8 bits, es decir un estándar de 24 bits, usando valores de intensidades de 0 a 255 por pixel. Observamos con detalle la saturación, definición de las áreas oscuras, número de anillos y desplazamiento espacial

Para cada figura se identificaron propiedades importantes en las imágenes de los patrones. A continuación se detallan las observaciones específicas:



- **Figura 11.3.d.** Los valores de intensidad R. El canal rojo de las imágenes de los patrones mostró la mayor saturación de intensidad por pixel (255). Esto representa una mejor resolución de intensidad en los valores de los anillos exteriores, permitiendo observar 3 anillos de luz. Este contraste entre zonas claras y oscuras facilita la detección de contornos.
- **Figura 11.3.e.** Los valores de intensidad G. El color verde, al encontrarse próximo en longitud de onda al rojo, presentó una intensidad suficiente para observar los dos primeros anillos del patrón. La ventaja que tiene sobre el canal rojo es que la imagen no presenta saturación en su perfil de intensidad. Esto se evidencia en la región central, el punto de mayor iluminación. También se observa que la intensidad capturada disminuye conforme aumenta la distancia radial. Este comportamiento no se alcanza a apreciar en el canal rojo.
- **Figura 11.3.f.** Los valores de intensidad B. Debido a que el canal azul está limitado debido a las herramientas ópticas usadas, la intensidad registrada en este canal resultó demasiado baja. En consecuencia, el canal azul no se utilizó en este análisis, sin embargo, puede ser considerado para un análisis dispersivo de color.
- **Figura 11.3.g.** Combinación R+G. En este patrón se puede observar el efecto llamado dispersión cromática, particularmente en el centro del patrón se nota el desfase espacial

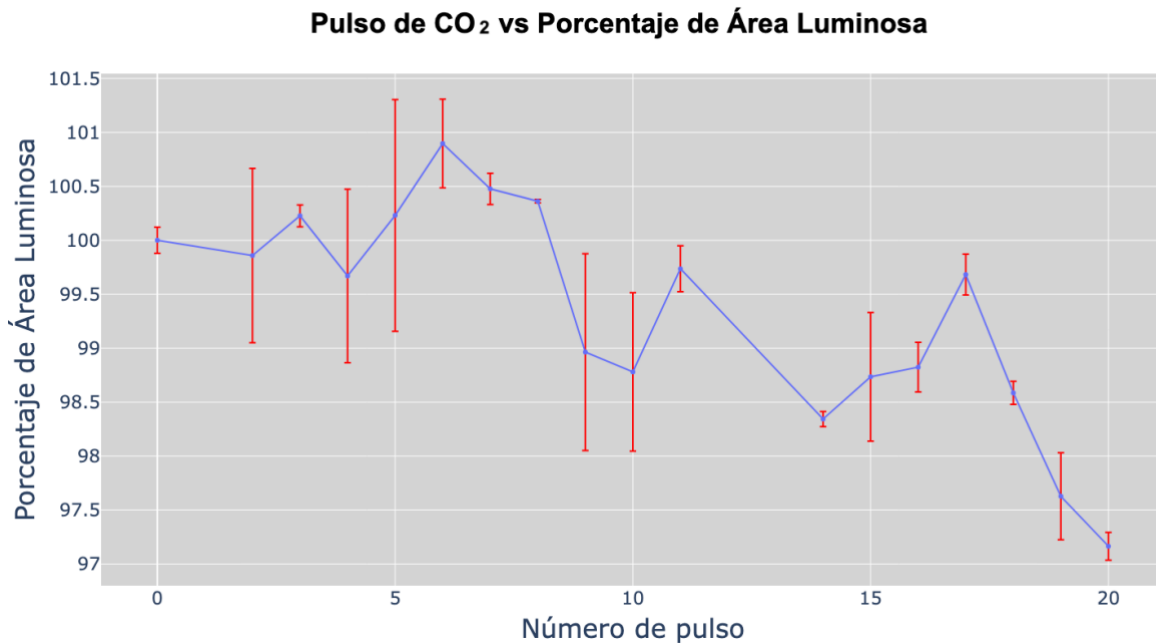
entre el rojo y el verde. Esto nos indica que es mejor separar los canales para evitar sobreponer las intensidades y deformar la circularidad de los mismos.

#### 11.4. Análisis de áreas luminosas

Una de las diferencias más notables entre patrones de difracción de distintas concentraciones de soluto, es el número de anillos y el área de las regiones luminosas. Es por este motivo que se decidió estudiar dichas variaciones a través de un tratamiento computacional.

Cabe destacar que, las diferencias en los patrones de difracción son más notables cuando se trabaja en rangos amplios de concentración de soluto. Sin embargo, en el caso del  $\text{CO}_2$ , las bajas concentraciones alcanzadas implican que las variaciones en los patrones de difracción sean sutiles.

Para el estudio de estas variaciones se tomó como referencia el área luminosa correspondiente a la muestra de agua pura. Este valor se utilizó para normalizar las áreas obtenidas de las muestras con  $\text{CO}_2$ , y posteriormente se multiplicó por 100 con el fin de expresar los resultados en términos porcentuales. La última muestra, correspondiente al pulso número 20, que presentó el valor más bajo, con una intensidad relativa del 97,16 %. Como se puede observar en la *Figura 11.4.a*.

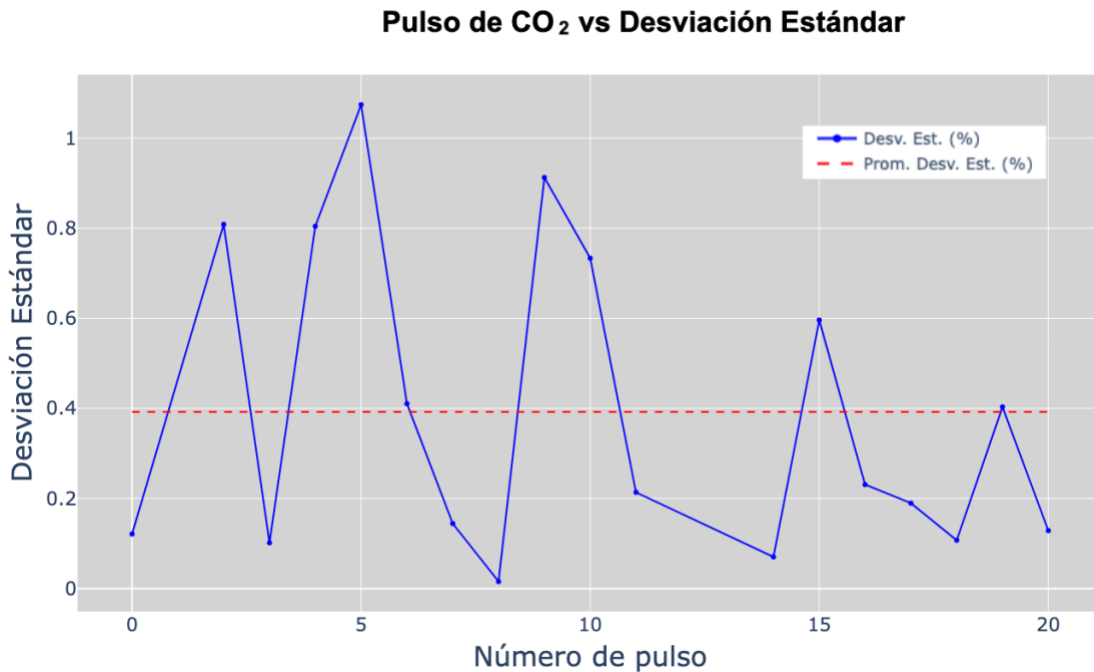


**Figura 11.4.a** Porcentaje de área luminosa en relación con la muestra de agua.

Con el propósito de determinar si esta diferencia era estadísticamente significativa, se calculó la desviación estándar de cada muestra (*Figura 11.4.b*). Inicialmente se consideró utilizar las cinco imágenes capturadas por patrón; sin embargo, tras un análisis individual se observó que las tres primeras imágenes presentaban una alta variabilidad, atribuida al paso de burbujas de  $\text{CO}_2$  cerca o a través del haz de luz. Por este motivo, solo se consideraron las imágenes cuatro y cinco para el cálculo final cuando el sistema está más estable. Asimismo, tres muestras fueron descartadas debido al excesivo ruido en sus patrones sensible por las burbujas generadas en la inyección de  $\text{CO}_2$ , lo que las hacía no representativas para el análisis cuantitativo.

Después de filtrar los datos, la desviación estándar promedio resultó de 0,39 %, con un valor máximo de 1.1 % en el pulso número 5. Dado que la intensidad relativa mínima registrada fue de 97.16 %, separada 2.9 % del valor inicial, se confirma una diferencia significativa entre la muestra de agua y aquella con la mayor concentración de  $\text{CO}_2$ .

Aunque la *Figura 11.4.a* no presenta una tendencia perfectamente lineal, los resultados muestran una disminución progresiva del área luminosa conforme se incrementa la cantidad de  $\text{CO}_2$  inyectado. Este comportamiento se asocia a un aumento en el número de anillos de difracción, lo que produce patrones más compactos y anillos internos más angostos. Dicho efecto ha sido observado previamente en experimentos realizados en el laboratorio de óptica del CFATA y coincide con lo reportado en la literatura para sistemas con mayor concentración de soluto.



**Figura 11.4.b** Desviación estándar para el patrón de cada pulso de CO<sub>2</sub>

Finalmente, se observó que el canal rojo (R) de la imagen RGB proporcionó los mejores resultados en la detección de contornos, debido a que la luz blanca se genera mediante el láser infrarrojo y cristal generador de luz blanca, resultando en una máxima intensidad en el canal rojo.

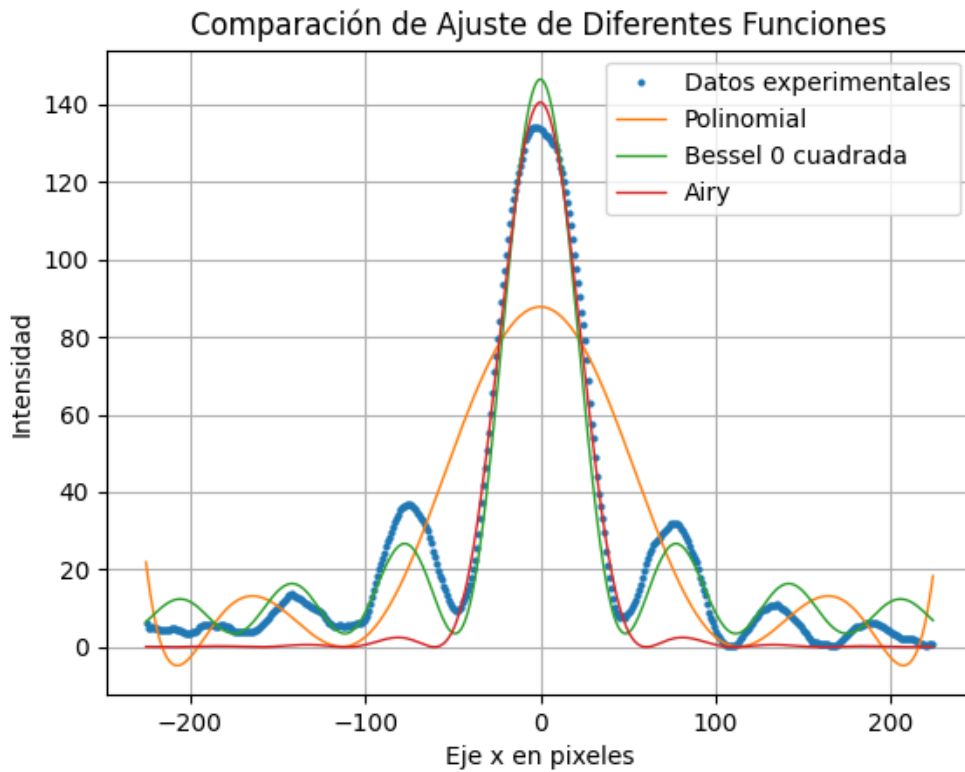
## 11.5. Ajuste de modelo matemático a perfiles de intensidad luminosa

### 11.5.1. Selección de modelo para ajuste de perfiles de intensidad.

Aunque el cálculo de áreas luminosas es un análisis válido de propiedades del patrón, realmente no proporciona una buena representación física del patrón de difracción. En discusiones de investigación en el CFATA y con la ayuda del Dr. Rafael Quintero, se propuso tomar un acercamiento más teórico, usando las ecuaciones ópticas que describen el fenómeno de difracción. Es en este contexto que se consideraron diferentes funciones para el ajuste de los perfiles de intensidad.

Como se menciona en la sección metodológica, se trabajó con tres modelos: una función polinomial, una función de Bessel y una función de Airy. Los resultados de estos ajustes se presentan en la Figura 11.5.a, donde los puntos azules representan los valores experimentales.

Para este análisis, la imagen original fue preprocesada de la misma forma que se hizo para el análisis de áreas luminosas, con la diferencia de que se seleccionó solo el canal verde del registro RGB por motivos que se cubrirán a detalle más adelante.



**Figura 11.5.a** Comparación visual del ajuste de los diferentes modelos al patrón de difracción de una muestra de agua.

La Figura 11.5.a presenta una comparación cualitativa de los diferentes modelos empleados para el ajuste de los perfiles de intensidad, permitiendo evaluar su desempeño sin recurrir a un análisis numérico de los errores. A partir de este análisis visual fue posible identificar las principales ventajas y limitaciones de cada modelo.

En primer lugar, el modelo polinomial no resultó adecuado para describir el comportamiento del patrón de difracción. Incluso al incrementar el número de términos, el ajuste no logra reproducir con precisión la región central de alta intensidad, mostrando desviaciones significativas respecto a los datos experimentales.

En contraste, la función de Airy reproduce de manera precisa la distribución de intensidad en la zona central del patrón; sin embargo, pierde validez en las regiones periféricas, donde los anillos de

difracción presentan una discrepancia más evidente. Esto se debe a que la función tiende a aplanarse en las zonas de menor intensidad, a diferencia de los datos experimentales obtenidos.

Finalmente, la función de Bessel modificada presentada en la metodología para el análisis de imágenes:

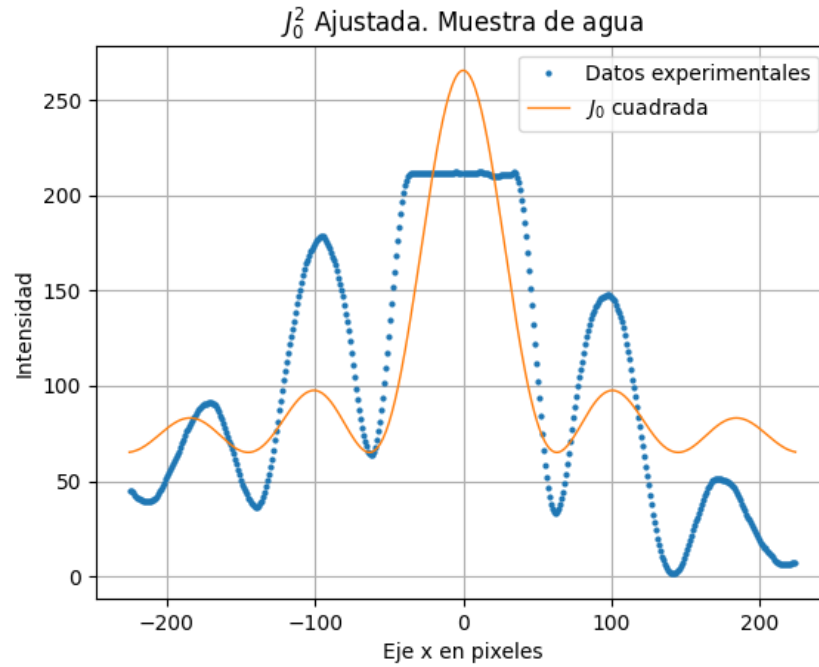
$$I(x) = a[J_0(f \cdot x)]^2 + c \quad (\text{Ecuación 11.9})$$

proporcionó un ajuste satisfactorio tanto en la región de mayor intensidad como en los picos correspondientes a los anillos de difracción. Si bien el ajuste no es exacto para todos los máximos, esta diferencia es esperable debido al ruido en las imágenes y a la ligera asimetría que se observa al comparar los valores de intensidad a ambos lados del máximo central. Para esta tesis y tomando en cuenta los puntos mencionados, se seleccionó definitivamente la función de Bessel como modelo de ajuste.

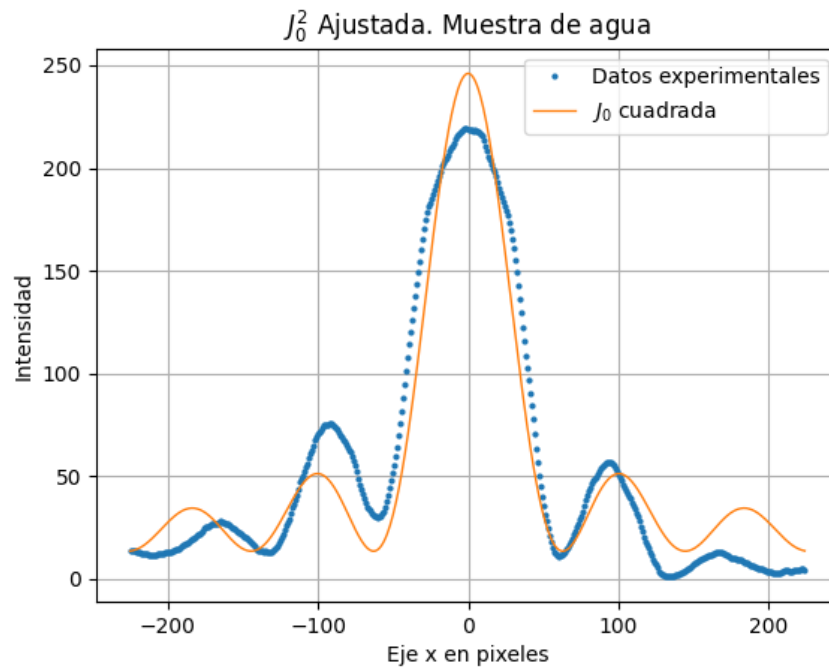
#### 11.5.2. Ajuste de Bessel cuadrada de orden cero.

Antes de proceder con el ajuste de datos experimentales, fue importante considerar las propiedades observadas de los canales RGB. Debido a la alta intensidad del canal rojo en las imágenes obtenidas, este no resultó adecuado para el ajuste mediante la función de Bessel, ya que presenta saturación en la región de mayor intensidad, como se muestra en la **Error! Reference source not found.**, aunque se tiene una mejor resolución de intensidad en los valores de los anillos externos.

Por otro lado, el canal verde del registro RGB, *Figura 11.5.c*, representa una buena opción, al no presentar saturación en la zona central y, al mismo tiempo, conservar un nivel de detalle suficiente en los anillos periféricos del patrón de difracción.

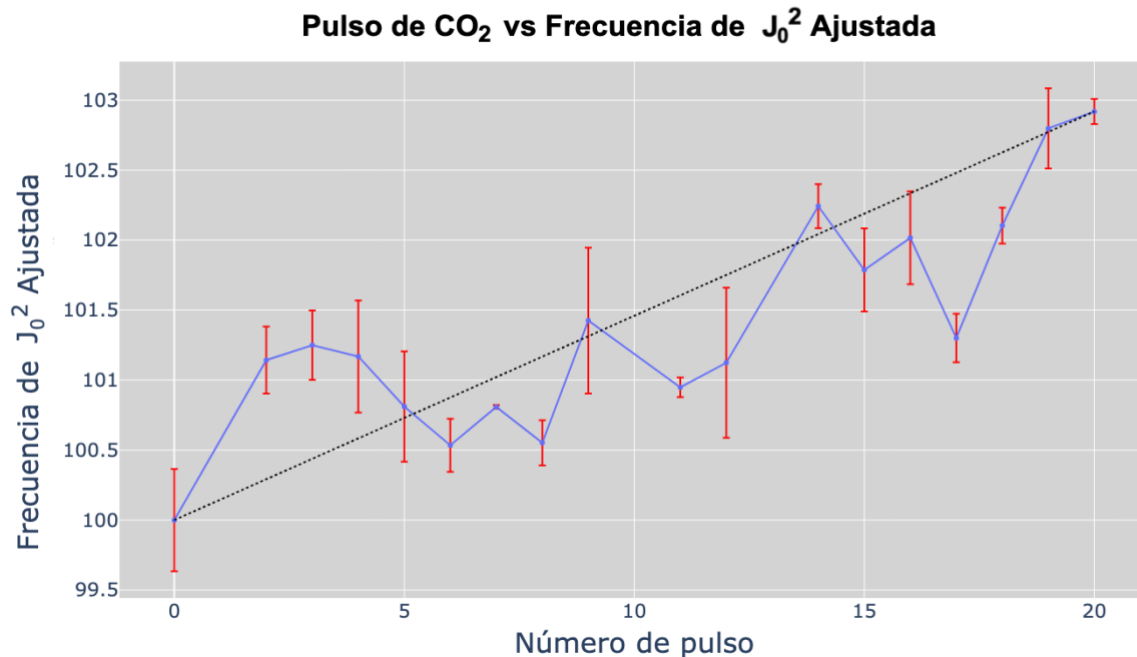


**Figura 11.5.b** Ajuste de Bessel al perfil de intensidad del color rojo



**Figura 11.5.c** Ajuste de Bessel al perfil de intensidad del color verde

Una vez seleccionado el modelo de Bessel y el canal verde del RGB, se realizó el ajuste de la función al patrón de difracción correspondiente a cada pulso de CO<sub>2</sub> y se graficó la variable de frecuencia contra el número de pulso para intentar visualizar alguna tendencia en nuestras mediciones.



**Figura 11.5.d** Ajuste de Bessel con desviación estándar y línea de tendencia

Aunque la frecuencia de la función de Bessel ajustada no incrementa de manera completamente lineal, sí evidencia una tendencia ascendente clara, particularmente al observar la traza que conecta la frecuencia correspondiente a la muestra de agua con la del pulso número 20 (ver *Figura 11.5.d*).

Las fluctuaciones observadas entre los pulsos intermedios pueden atribuirse a diversos factores experimentales y se presenta una interpretación física de estos resultados y se proponen ajustes metodológicos para mejorar la precisión de las mediciones posteriores.

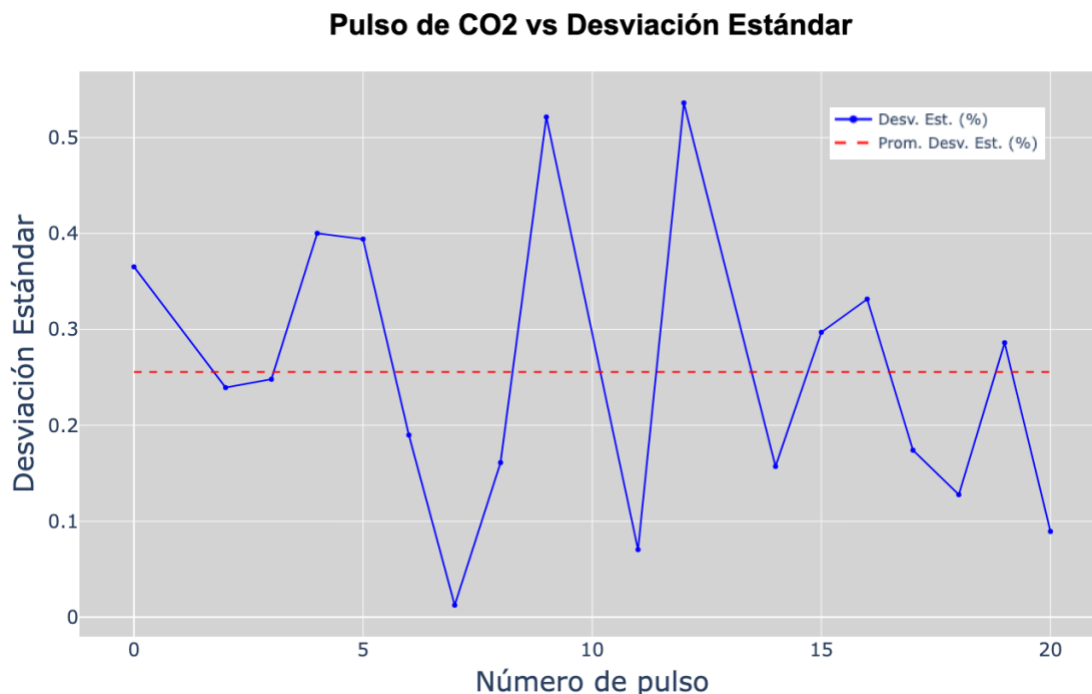
La variabilidad observada se atribuyó principalmente a cambios dinámicos de presión y temperatura durante la captura de los patrones de difracción donde se requiere un tiempo de estabilidad para la una medida optima. Con ayuda del interferómetro Michelson integrado para monitorizar la temperatura de forma óptica en el arreglo experimental del sistema de espectroscopia de lente termica, se pudo observar claramente una fluctuación de temperatura al momento de inyectar CO<sub>2</sub>, que al paso de un tiempo se estabiliza. Este fenómeno se explica porque el láser infrarrojo empleado para generar el gradiente térmico local calienta la muestra de forma rápida pero requiere algunos milisegundos para estabilizar el patrón de difracción, mientras que la dinámica del gas frio de CO<sub>2</sub>

inyectado se encuentra avanzando hacia el contenedor, provocando un intercambio de calor entre ambos medios. También se observa la dinámica de inyección con un flujo de burbujas desde el fondo de la celda hacia la superficie del menisco del líquido. El restablecimiento del equilibrio en la dinámica y temperatura del líquido requiere de cierto tiempo, por lo que es probable que algunas de las capturas se hayan realizado antes de que la muestra alcanzara este equilibrio.

Para futuras mediciones se recomienda tanto el uso del interferómetro para monitorear de mejor manera las fluctuaciones térmicas, como limitar el movimiento del líquido causado por las burbujas. Esto representa erradicar el ruido generado por fluctuaciones naturales del sistema.

Asimismo, se sugiere conservar los medidores de presión como retroalimentación a el control de inyección para mejorarlo, con el fin de estabilizar la presión antes de iniciar la inyección de  $\text{CO}_2$ .

La implementación conjunta de estas mejoras permitiría disponer de un sistema con control de presión y de temperatura, lo que incrementaría notablemente la precisión experimental y reduciría las fluctuaciones y el ruido presentes en las imágenes.



**Figura 11.5.e** Desviación estándar de los ajustes de la función de Bessel modificada

El ajuste basado en la función de Bessel presentó una desviación estándar considerablemente menor, aproximadamente la mitad de la observada en el análisis de áreas luminosas. En promedio,

la desviación estándar calculada fue de 0.26 %, lo que sugiere que este método ofrece una mayor precisión y estabilidad en la estimación de los parámetros experimentales. Si bien la diferencia entre el primer y el último valor se mantuvo cercana al 3 %, el error asociado al ajuste fue menor, lo que permite confiar con mayor certeza en los resultados obtenidos a partir de este enfoque.

## 11.6. Consideración de la presión parcial de CO<sub>2</sub>

En la sección previa sobre el análisis de patrones de difracción se habrá notado que se utilizó el número de pulso como variable en el eje x de las gráficas. Sin embargo, esta variable no constituye una unidad física, y aunque es útil para observar las variaciones de los patrones en el tiempo, no permite establecer una correlación entre la concentración de CO<sub>2</sub> y los cambios observados en los patrones de difracción.

Para relacionar cuantitativamente el CO<sub>2</sub> inyectado con las variaciones observadas, la forma más directa sería utilizar el volumen de inyección configurado como referencia para el cálculo de partículas de CO<sub>2</sub> inyectadas por pulso. Sin embargo, lo que los datos experimentales mostraron, es que se debe monitorear la cantidad de gas inyectado, no simplemente tomar el valor configurado como referencia de inyección, esto se demuestra a continuación.

### 11.6.1. Presión teórica contra presión experimental

Una parte fundamental de la configuración utilizada para la obtención de patrones de difracción es la cubeta óptica de cuarzo cerrada. Esta es sellada herméticamente, impidiendo la fuga de gas y permitiendo únicamente la conexión de la jeringa de inyección y el medidor de presión. El volumen total de la cubeta es de 4 mL, de los cuales 2 mL corresponden al volumen de agua ultrapura (mQ), dejando un espacio libre de 2 cm<sup>3</sup> ocupado por aire. Finalmente hay que mencionar que para la obtención de patrones se configuró la inyección de 20 pulsos de 2 cm<sup>3</sup> de CO<sub>2</sub> cada uno.

Considerando estos valores en nuestra configuración, es posible aproximar la presión teórica que debería alcanzar el recipiente, aunque cabe mencionar que para tener una estimación más precisa debería considerarse la disolución de CO<sub>2</sub>. Para esta aproximación consideramos la ley de los gases ideales, teniendo en cuenta que la temperatura y el volumen del recipiente permanecen constantes:

$$PV = nRT \rightarrow P = \frac{RT}{V} \cdot n \rightarrow P = C \cdot n \quad (\text{Ecuación 11.10})$$

$$\text{donde } C = \frac{RT}{V}$$

Donde  $V$ , el volumen que delimita el gas, es el espacio libre en la cubeta óptica,  $2 \text{ cm}^3$ .

Expresando la presión total en función de las condiciones iniciales:

$$P = C \cdot n_{total} \quad ; \quad n_{total} = n_0 + n_{iny}$$

La nueva presión será:

$$P = C(n_0 + n_{iny}) \quad \text{(Ecuación 11.11)}$$

Sustituimos el valor de  $C$  de acuerdo a la ecuación 11.10 y escribimos el número de partículas de acuerdo a la ley de los gases ideales:

$$P = \frac{RT}{V} * \left[ \left( \frac{P_0 \cdot V_0}{RT} \right) + \frac{(P_{iny} \cdot V_{iny})}{RT} \right]$$

En este caso, el volumen inicial de aire es el espacio libre en la cubeta óptica, es decir,  $V_0 = V$ . Por lo tanto, al sustituir  $V$  por  $V_0$  los volúmenes del primer producto se eliminan. Asimismo, las constantes  $R$  y  $T$  se cancelan al factorizar. Finalmente tenemos:

$$P = P_0 + \frac{(P_{iny} \cdot V_{iny})}{V_0} \quad \text{(Ecuación 11.12)}$$

Esta ecuación corresponde exactamente a la expresión de presión total como suma de presiones parciales. El término  $P_0$  representa la presión parcial del aire inicialmente contenido en el recipiente, mientras que el segundo término representa la presión parcial del  $\text{CO}_2$  inyectado. Por lo tanto:

$$p\text{CO}_2 = \frac{(P_{iny} \cdot V_{iny})}{V_0} \quad \text{(Ecuación 11.13)}$$

En donde existen 2 variables, la presión del gas inyectado,  $P_{iny}$ , y el volumen inyectado,  $V_{iny}$ . Tras revisar el manual del instrumento de inyección CARBOMED, se determinó que la presión de inyección puede estar entre 1 atm y el límite de funcionamiento de la máquina, 2.75 atm. Esta presión depende de propiedades mecánicas de los conductos del gas y de su salida, es decir de la saturación de la manguera y de la presión a la salida en la punta de la aguja de inyección.

Considerando  $P_{iny} = 1 \text{ atm}$  para obtener valores bajos de  $p\text{CO}_2$ , más cercanos a los datos experimentales y sustituyendo gas inicial  $V_0 = 3 \text{ cm}^3$ , obtenemos la siguiente expresión y valores de  $p\text{CO}_2$  teóricos:

$$pCO_2(V_{iny}) = \frac{V_{iny}}{3 \text{ cm}^3} \text{ atm} \quad (\text{Ecuación 11.14})$$

$$pCO_2(15\text{cm}^3) = 5 \text{ atm} \quad ; \quad pCO_2(40\text{cm}^3) = 13.3 \text{ atm}$$

Donde  $10\text{cm}^3$  equivalen a 5 pulsos inyectados y  $4\text{cm}^3$  a 2 pulsos. Comparando estos cálculos con los valores experimentales de  $pCO_2$  mostrados en la **Tabla 11.a**. Podemos ver que los valores experimentales son mucho menores a lo anticipado.

|               |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|---------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Pulso         | 1     | 2     | 3     | 4     | 5     | 6     | 7     | 8     | 9     | 10    |
| $pCO_2$ (atm) | 0.063 | 0.148 | 0.256 | 0.355 | 0.473 | 0.592 | 0.730 | 0.868 | 1.017 | 1.204 |
| Pulso         | 11    | 12    | 13    | 14    | 15    | 16    | 17    | 18    | 19    | 20    |
| $pCO_2$ (atm) | 1.382 | 1.570 | 1.777 | 2.004 | 2.221 | 2.468 | 2.655 | 2.715 | 2.724 | 2.724 |

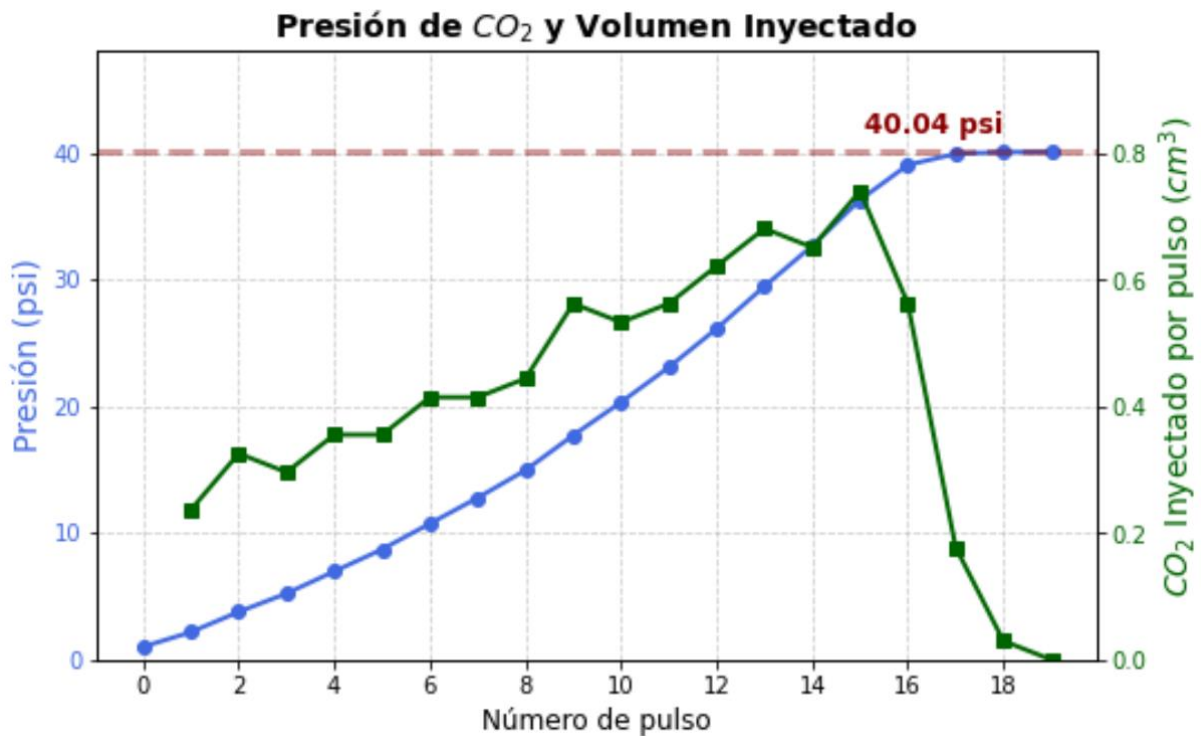
**Tabla 11.a** Valores de  $pCO_2$  correspondientes a los diferentes números de pulsos

Incluso considerando la disolución del gas en el agua, esta pérdida no explica por completo la discrepancia observada, ya que los valores de presión experimental llegan a ser menores al 20% de la presión teórica calculada.

Otra utilidad de obtener la ecuación 11.14 es que nos permite calcular el volumen de  $CO_2$  real inyectado por cada pulso configurado en función de la presión parcial medida. Esto es posible ya que la relación es directamente proporcional, y por lo tanto la ecuación se puede escribir como:

$$\Delta V_{iny} = \frac{\Delta pCO_2}{3 \text{ cm}^3 \cdot \text{atm}} \quad (\text{Ecuación 11.15})$$

La **Figura 11.6.a** muestra los datos de  $pCO_2$  de la **Tabla 11.a**, graficados en función del número de pulsos. Utilizando la ecuación 11.15 podemos visualizar también el volumen de  $CO_2$  inyectado por pulso, trazado en color verde. Analizando la figura podemos notar que el sistema inyectó una mayor cantidad de  $CO_2$  conforme aumentaba la presión en la cubeta óptica. Esto puede estar relacionado con la variación que mencionamos en la presión de inyección  $P_{iny}$ . Dependiendo del funcionamiento de la máquina, puede ser que al aumentar la presión del sistema cerrado, la máquina compense aumentando la presión de inyección. Esto significaría un aumento en la cantidad de gas inyectado de acuerdo a la ley de los gases ideales. ( $n = PV/RT$ ).



**Figura 11.6.a** Límite de presión y volumen de  $\text{CO}_2$  por pulso.

Se observó también que a presiones cercanas a 40 psi ( $\approx 2.75$  bar), el sistema ya no era capaz de continuar con la inyección de gas. Este comportamiento indicaba la existencia de un límite de funcionamiento determinado por la presión máxima alcanzable en la punta de la aguja de inyección. El cual se confirmó al revisar las especificaciones del dispositivo CARBOMED (observar la sección de materiales).

La causa del límite de presión se identificó al conocer su valor máximo: 40 psi. Este valor corresponde a la presión configurada en la válvula que regula la salida de  $\text{CO}_2$  desde el tanque al sistema CARBOMED. Al analizar el sistema en su conjunto, se comprende que, una vez que la presión en la cubeta óptica alcanza los 40 psi, ésta es igual a la presión de salida del gas. En consecuencia, el flujo de gas se detiene, ya que no existe un diferencial de presión que permita su avance desde el tanque hacia la cubeta. De este modo, se establece un límite físico en el sistema.

## 11.7. Determinación de concentraciones del sistema carbonato mediante $p\text{CO}_2$

Si deseamos utilizar la presión parcial de  $\text{CO}_2$  como medida de control de la disolución de  $\text{CO}_2$  en agua, es necesario establecer con gran precisión, mediante ecuaciones químicas, la relación entre ambas variables. A continuación se muestra el desarrollo seguido para el cálculo de las concentraciones de los compuestos involucrados en el equilibrio de disociación del ácido carbónico.

### 11.7.1. Cálculo teórico de disolución con ley de Henry

Como observamos en el marco teórico, la disolución de un gas en contacto con un cuerpo líquido depende directamente de la presión parcial que dicho gas ejerce en su superficie. Según la ley de Henry:

$$[\text{CO}_2] = H * p\text{CO}_2 \quad (\text{Ecuación 11.16})$$

En el caso particular del dióxido de carbono, la constante de Henry tiene el siguiente valor:  $H = 3.38 \times 10^{-2}$  a condiciones estándar (Sander, 2023).

### 11.7.2. Ecuaciones químicas relacionadas al proceso de disociación del ácido carbónico

Retomando las tres ecuaciones de acidificación presentadas en el marco teórico, en esta sección se calculan las concentraciones de los diferentes compuestos en función de la presión parcial de  $\text{CO}_2$ . Las constantes de equilibrio utilizadas en los cálculos presentados se extrajeron de libros y artículos especializados (Atkins & de Paula, 2014; Stumm & Morgan, 1996; Sander, 2023).

En la primera fase de este proceso, el dióxido de carbono disuelto en agua está en equilibrio con el ácido carbónico, como se muestra en la siguiente ecuación:



En esta reacción la constante de equilibrio a  $25^\circ\text{C}$  es  $K_h = 1,70 \times 10^{-3}$ , lo que significa que la mayor parte del dióxido de carbono no se convierte en ácido carbónico y permanece como moléculas de  $\text{CO}_2$ . No obstante, este bajo porcentaje tiene un gran impacto en el pH del compuesto. Esto se debe a que el ácido carbónico es diprótico, es decir, tiene dos hidrógenos que se disocian y, por tanto, da lugar a las siguientes dos reacciones de acidificación:



$$K_{a1} = 2.5 \times 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L}}; \quad pK_{a1} = 3.60 \text{ a } 25^\circ\text{C}.$$



$$K_{a2} = 5.61 \times 10^{-11} \frac{\text{mol}}{\text{L}}; \quad pK_{a2} = 10.25 \text{ a } 25^\circ\text{C}.$$

Finalmente, se debe tener en cuenta el equilibrio de hidratación entre el  $CO_2$  disuelto y el  $H_2CO_3$ , es decir:

$$K_h = \frac{[H_2CO_3]}{[CO_2]} = 1.70 \times 10^{-3} \quad (\text{Ecuación 11.20})$$

### 11.7.3. Desarrollo de fórmulas para el cálculo de concentración de compuestos

Para obtener la primera fórmula para el cálculo de concentraciones podemos utilizar la ley de Henry, que muestra el equilibrio entre el  $CO_2$  disuelto y el  $CO_2$  gaseoso encima de la solución:

$$[CO_2] = \frac{pCO_2}{K_H} \quad (\text{Ecuación 11.21})$$

Donde  $K_H = 29.76 \text{ atm}/(\text{mol/L})$  a condiciones estándar.

Para calcular la concentración de  $H_2CO_3$  escribimos la ecuación de la constante de equilibrio de la reacción 11.17 y despejamos:

$$K_h = \frac{[H_2CO_3]}{[CO_2]} \rightarrow [H_2CO_3] = K_h \cdot [CO_2]$$

$$[H_2CO_3] = K_h \cdot \frac{pCO_2}{K_H} \quad (\text{Ecuación 11.23})$$

Después debemos utilizar la ecuación de la constante de equilibrio de la reacción 11.18 para obtener:

$$[H^+] = \frac{k_{a1} \cdot [H_2CO_3]}{[HCO_3^-]} \quad (\text{Ecuación 11.24})$$

Debido a que la ecuación 11.24 presenta dos variables, debemos introducir otra ecuación para resolver este sistema. La condición de neutralidad nos ayuda a simplificar las expresiones si consideramos que la concentración de  $[CO_3^{2-}]$  toma el valor de cero:

$$[H^+] = [OH^-] + [HCO_3^-] + 2 [CO_3^{2-}] \rightarrow [HCO_3^-] = [H^+] - [OH^-] \quad (\text{Ecuación 11.25})$$

Sustituyendo la ecuación 11.25 en 11.24 y desarrollando:

$$[H^+] = \frac{k_{a1} \cdot [H_2CO_3]}{[H^+] - [OH^-]} \rightarrow [H^+]^2 - [H^+][OH^-] = k_{a1} \cdot [H_2CO_3]$$

Posteriormente identificamos que  $[H^+][OH^-] = 10^{-14}$  es el producto iónico del agua, lo sustituimos por su valor y despejamos la concentración de  $H^+$ :

$$[H^+] = \sqrt{(10^{-14} + k_{a1} \cdot [H_2CO_3])} \quad (\text{ecuación 11.26})$$

Sustituyendo ecuación 11.23 podemos expresar  $[H^+]$  directamente en función de  $pCO_2$

$$[H^+] = \sqrt{(10^{-14} + k_h \cdot \frac{k_{a1}}{k_H} * pCO_2)} \quad (\text{ecuación 11.27})$$

Para calcular la concentración del compuesto faltante,  $[HCO_3^-]$  utilizamos la ecuación 11.25 y el producto iónico del agua:

$$[HCO_3^-] = [H^+] - \frac{10^{-14}}{[H^+]} \quad (\text{ecuación 11.28})$$

#### 11.7.4. Desarrollo de fórmulas para el cálculo de concentración de compuestos

Una vez obtenidas las ecuaciones de concentración de los diferentes compuestos involucrados en la disolución de  $CO_2$  en agua, podemos calcular las concentraciones teóricas de la muestra usando la presión parcial medida en cada pulso de inyección.

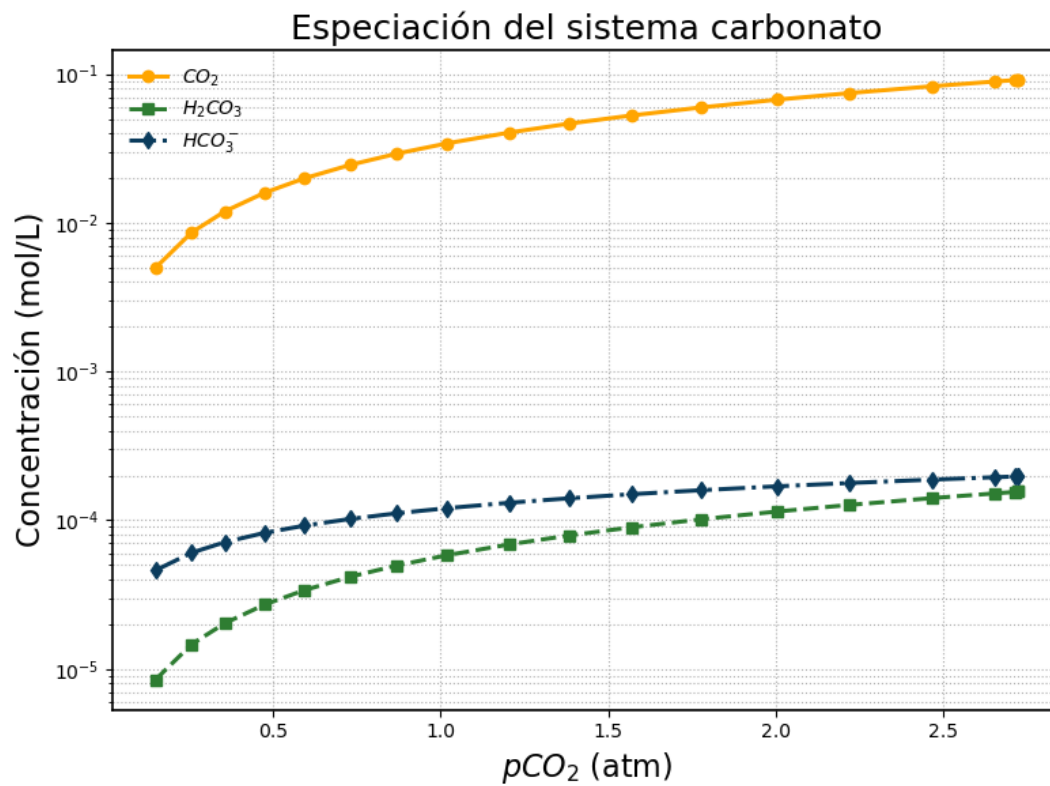
Los valores de la *Tabla 11.b* se calcularon mediante un programa en Python. Las ecuaciones utilizadas fueron: 11.21 para la cuarta columna, 11.23 para la quinta columna y 11.28 para la última columna. Para el cálculo de pH, utilizamos:  $pH = -\log[H^+]$ .

| No. Pulso | $pCO_2$ (atm) | $pH$  | $CO_2$ (mol/L) | $H_2CO_3$ (mol/L)      | $HCO_3^-$ (mol/L)      |
|-----------|---------------|-------|----------------|------------------------|------------------------|
| 1         | 0.069         | 4.503 | 0.002          | $3.947 \times 10^{-6}$ | $3.141 \times 10^{-5}$ |
| 2         | 0.148         | 4.337 | 0.005          | $8.459 \times 10^{-6}$ | $4.599 \times 10^{-5}$ |
| 3         | 0.257         | 4.218 | 0.009          | $1.466 \times 10^{-5}$ | $6.054 \times 10^{-5}$ |
| 4         | 0.355         | 4.147 | 0.012          | $2.030 \times 10^{-5}$ | $7.124 \times 10^{-5}$ |
| 5         | 0.474         | 4.085 | 0.016          | $2.707 \times 10^{-5}$ | $8.226 \times 10^{-5}$ |
| 6         | 0.592         | 4.036 | 0.020          | $3.383 \times 10^{-5}$ | $9.197 \times 10^{-5}$ |
| 7         | 0.731         | 3.991 | 0.025          | $4.173 \times 10^{-5}$ | $1.021 \times 10^{-4}$ |
| 8         | 0.869         | 3.953 | 0.029          | $4.962 \times 10^{-5}$ | $1.114 \times 10^{-4}$ |
| 9         | 1.017         | 3.919 | 0.034          | $5.808 \times 10^{-5}$ | $1.205 \times 10^{-4}$ |
| 10        | 1.204         | 3.882 | 0.040          | $6.880 \times 10^{-5}$ | $1.311 \times 10^{-4}$ |
| 11        | 1.382         | 3.852 | 0.046          | $7.895 \times 10^{-5}$ | $1.405 \times 10^{-4}$ |
| 12        | 1.570         | 3.825 | 0.053          | $8.966 \times 10^{-5}$ | $1.497 \times 10^{-4}$ |
| 13        | 1.777         | 3.798 | 0.060          | $1.015 \times 10^{-4}$ | $1.593 \times 10^{-4}$ |
| 14        | 2.004         | 3.772 | 0.067          | $1.145 \times 10^{-4}$ | $1.692 \times 10^{-4}$ |
| 15        | 2.221         | 3.749 | 0.075          | $1.269 \times 10^{-4}$ | $1.781 \times 10^{-4}$ |
| 16        | 2.468         | 3.726 | 0.083          | $1.410 \times 10^{-4}$ | $1.877 \times 10^{-4}$ |
| 17        | 2.655         | 3.711 | 0.089          | $1.517 \times 10^{-4}$ | $1.947 \times 10^{-4}$ |
| 18        | 2.715         | 3.706 | 0.091          | $1.551 \times 10^{-4}$ | $1.969 \times 10^{-4}$ |
| 19        | 2.725         | 3.705 | 0.092          | $1.556 \times 10^{-4}$ | $1.973 \times 10^{-4}$ |
| 20        | 2.725         | 3.705 | 0.092          | $1.556 \times 10^{-4}$ | $1.973 \times 10^{-4}$ |

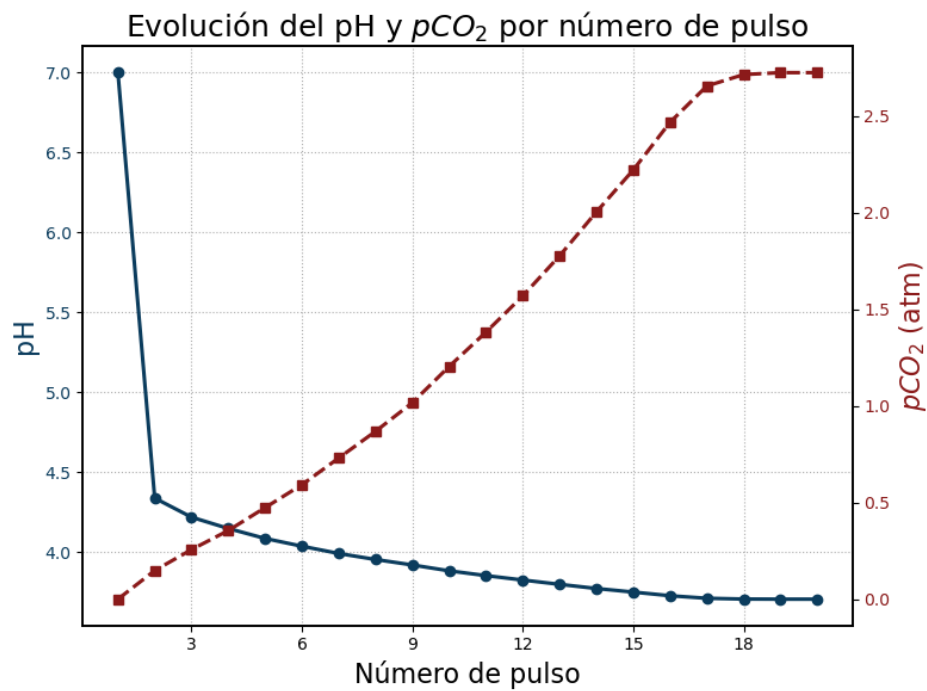
**Tabla 11.b** Valores de concentración de compuestos en función de  $pCO_2$

La **Figura 11.7.a**, muestra la gráfica correspondiente a los datos presentados. Esta nos permite visualizar, en escala logarítmica, las proporciones de los diferentes compuestos al igual que su cambio en función de la presión parcial de  $CO_2$ . Se puede observar que en los primeros puntos existe un incremento mayor de concentración, particularmente para el  $CO_2$  y el ion bicarbonato ( $HCO_3^-$ ). Ambos compuestos aumentan su concentración más de un orden de magnitud, comparando al pasar del primer al último valor de presión, mientras que el ácido carbónico  $H_2CO_3^-$  incrementa de forma más lineal.

También se presenta el comportamiento del pH y la presión parcial medida en función del número de pulso. Este se muestra en la **Figura 11.7.b** y sirve para visualizar la acidificación. La gráfica reitera lo que observó en el primer estudio de pH de esta tesis, mostrando que el valor de pH disminuye en mayor medida en los primeros pulsos estabilizándose un poco en los pulsos posteriores.



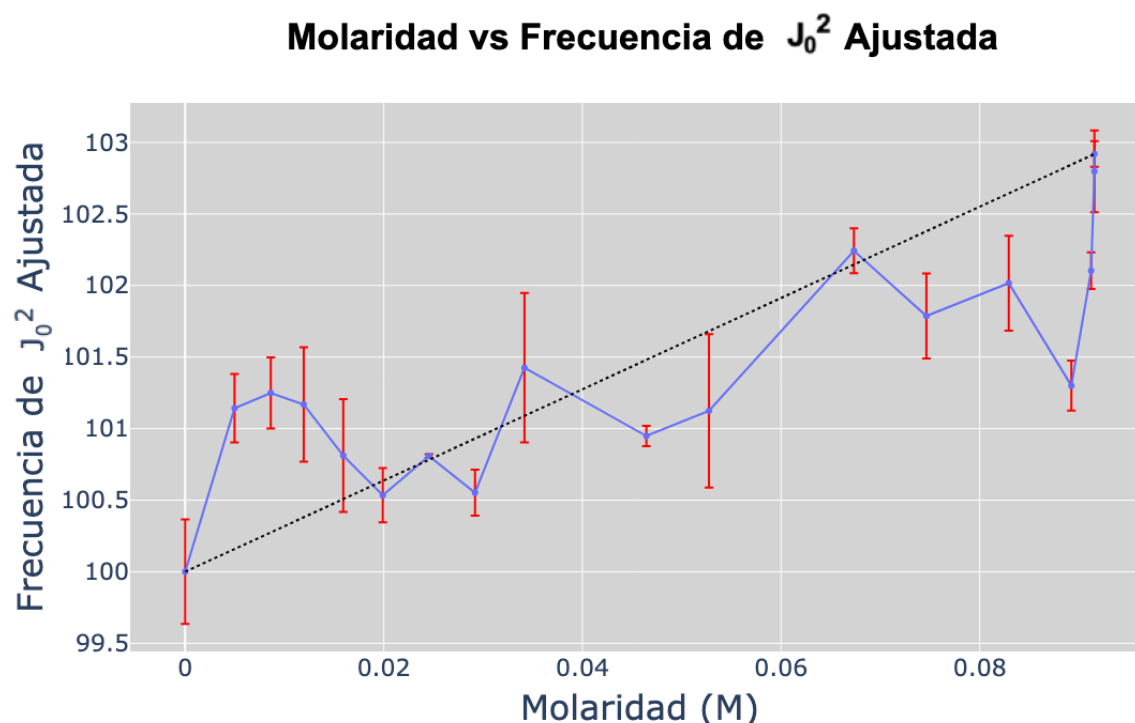
**Figura 11.7.a** Visualización de límite de presión en la inyección de  $\text{CO}_2$



**Figura 11.7.b** Cambio de  $p\text{CO}_2$  y pH en función del número de pulso

## 11.8. Ajuste de Bessel a los perfiles de intensidad incorporando la concentración molar de $\text{CO}_2$

Finalmente, una vez calculadas las aproximaciones de molaridad (M), esta sección presenta la una gráfica similar a la *Figura 11.5.d*, utilizando los valores de molaridad en lugar del número de pulso como variable en el eje x. Esta gráfica puede observarse en la *Figura 11.8.a*.



**Figura 11.8.a** Frecuencia de Bessel ajustada en función de concentración molar de  $\text{CO}_2$

En general, ambas gráficas —tanto la que utiliza el número de pulso como la que emplea la concentración de  $\text{CO}_2$ — muestran un comportamiento similar. La principal diferencia aparece en el punto en el que el sistema alcanza su límite de inyección. En este límite, observado previamente cuando la presión parcial alcanza y se mantiene en 2.725 atm, ya no se produce un incremento en la molaridad de  $\text{CO}_2$ . Como consecuencia, los últimos tres puntos aparecen muy próximos entre sí en el eje X.

Este hecho resulta particularmente útil, ya que estos tres puntos, correspondientes a concentraciones prácticamente iguales, presentan valores similares de frecuencia en su función de Bessel ajustada, alrededor de 102.5%,. Considerando además que la desviación estándar promedio es menor a 0.3% (*Figura 11.5.e*), este resultado confirma que el método alcanza la sensibilidad necesaria para la detección de  $\text{CO}_2$  incluso a bajas molaridades.

## 12. Trabajos futuros

Como mejoras para futuras investigaciones, se proponen los siguientes puntos:

- Capturar al menos 10 imágenes por pulso para reducir la variabilidad asociada a la toma de datos.
- Aumentar el tiempo entre pulsos a aproximadamente 4 minutos y realizar la captura al final de este tiempo de relajación, asegurando que el sistema regrese a condiciones lo más estables posible.
- Verificar que la temperatura de la muestra y del gas inyectado sea la misma, para evitar variaciones térmicas no controladas que puedan afectar la formación del lente térmico.
- Implementar el dispositivo Peltier desarrollado, con el fin de trabajar a temperaturas más bajas. De acuerdo con la teoría, la solubilidad del  $\text{CO}_2$  aumenta al disminuir la temperatura, por lo que esto podría amplificar el efecto observado.
- Explorar un incremento de anillos en la difracción, a través del aumento de la potencia del láser, lo que permitiría un análisis más detallado.
- Incorporar el uso del interferómetro para el monitoreo óptico continuo de la temperatura, especialmente útil para registrar la temperatura exacta al momento de la captura y observar las fluctuaciones generadas durante la inyección de  $\text{CO}_2$ .

Por otro lado, también es importante señalar los aspectos de la metodología que demostraron ser adecuados y que se recomienda mantener: la medición de la presión parcial de  $\text{CO}_2$ , la configuración de inyección (dos dosis de 20 cc, 2 cc por pulso), y el análisis utilizando el canal verde de las imágenes, el cual ofreció mejor contraste para el procesamiento.

Observaciones más detalladas sobre la interpretación de los resultados se presentan en la sección de conclusiones.

## 13. Conclusiones

A lo largo de este trabajo se abordó una pregunta muy concreta: si es posible detectar la presencia de bajas concentraciones de  $\text{CO}_2$  en agua mediante el análisis de los patrones de difracción generados por espectroscopía de lente térmica. Todas las etapas desarrolladas —desde la preparación de muestras hasta el procesamiento de los perfiles de intensidad— estuvieron dirigidas a responder esa pregunta con base experimental. Fue posible el aumento local de temperatura que modifica el índice de refracción del medio, para detectar con patrones de difracción, la presencia de bajas concentraciones de  $\text{CO}_2$  en agua, es decir, con pulsos de inyección automatizado de  $\text{CO}_2$ .

En primer lugar, la implementación del sistema de inyección automatizado de  $\text{CO}_2$  permitió adaptar de manera funcional un equipo comercial (CARBOMED) para la preparación controlada de muestras acuosas. Se identificó claramente un límite físico del sistema asociado a la presión máxima de operación (40 psi  $\approx$  2.7 atm), así como la disminución del volumen efectivamente inyectado conforme aumenta la presión (p.e. con pasos de 1cc o 2cc de gas, pero el sistema puede hacer pasos mínimos con la digitalización del sistema de control). Este análisis no solo permitió entender el comportamiento real del sistema, sino también establecer con mayor claridad las condiciones experimentales bajo las cuales se trabajó.

Por otra parte, el cálculo de la concentración de  $\text{CO}_2$  disuelto a partir de las mediciones de pH y de las relaciones de equilibrio químico permitió estimar la molaridad en cada punto de inyección. Aunque el método electroquímico presenta limitaciones asociadas a su tiempo de respuesta y dimensiones, fue suficiente para obtener un orden de magnitud confiable de las concentraciones trabajadas. Esto fue importante porque dio contexto cuantitativo a los cambios observados en los patrones ópticos.

En cuanto al objetivo principal del trabajo, los resultados muestran que incluso a bajas concentraciones la presencia de  $\text{CO}_2$  modifica de manera observable la intensidad del lente térmico. A través del ajuste de los perfiles experimentales a funciones de Bessel de orden cero y el análisis de áreas luminosas, se logró identificar diferencias sistemáticas entre la muestra de agua pura y la muestra con  $\text{CO}_2$  disuelto. Estas diferencias no fueron aleatorias: presentaron un comportamiento consistente conforme aumentaba la inyección de gas y la molaridad.

Como se menciona en la sección de trabajos futuros, el presente trabajo de investigación también permitió identificar posibles mejoras en el sistema experimental, entre ellas una mayor estabilidad

en la presión y la temperatura, el incremento en el número de anillos del patrón de difracción para mejorar la resolución, la implementación de intervalos de cuatro minutos entre pulsos para favorecer una mayor difusión del gas y la estabilización del sistema líquido, así como el aumento en el número de imágenes capturadas por pulso.

Aun sin la implementación de estas mejoras, los resultados obtenidos son suficientes para afirmar que el método es sensible a la presencia de  $\text{CO}_2$  en agua. La detección de una diferencia significativa entre agua pura y agua con  $\text{CO}_2$ , bajo las condiciones actuales del montaje experimental, valida el principio físico sobre el cual se fundamenta la hipótesis de trabajo.

En este sentido, el objetivo planteado al inicio puede considerarse cumplido. Se demostró experimentalmente que la espectroscopía de lente térmica es capaz de distinguir cambios inducidos por la disolución de  $\text{CO}_2$  en agua, incluso cuando las concentraciones son relativamente bajas. Más allá de la cuantificación absoluta, se confirmó la viabilidad del enfoque.

Finalmente, este trabajo deja abierta una línea clara de continuidad. Existen mejoras instrumentales y metodológicas que podrían incrementar la sensibilidad y reducir la incertidumbre experimental, tal como ya se anticipa en el propio documento. Sin embargo, los resultados presentados aquí son todos los obtenidos dentro del alcance de esta tesis y constituyen una base sólida para futuras investigaciones.

En conclusión, se logró establecer una relación experimental entre la presencia de  $\text{CO}_2$  en agua y la modificación de los patrones de difracción generados por un lente térmico inducido. No se trata únicamente de haber generado patrones, sino de haber mostrado que contienen información física relevante. Ese es, en esencia, el aporte central de este trabajo.

## 14. Bibliografía

Atkins, P., & de Paula, J. (2014). *Physical Chemistry* (10th ed.). Oxford University Press.

Ban, Z. H., Keong, L. K., & Mohd Shariff, A. (2014). *Physical absorption of CO<sub>2</sub> capture: a review. Advanced Materials Research*, 917, 134-143.

Bante220 Portable PH Meter - Bante Instruments. (n.d.). <http://www.bante-china.com/enproductsview/588.html>

Brown, T. L., LeMay, H. E., Bursten, B. E., Murphy, C., Woodward, P., & Stoltzfus, M. (2018). *Chemistry: The Central Science* (14th ed.). Pearson.

CO2Meter. (2024, 26 de septiembre). *What is a CO<sub>2</sub> Detector and How Does it Work?* CO2Meter. Recuperado de <https://www.co2meter.com/en-mx/blogs/news/co2-carbon-dioxide-detector>

Collings, A. F., & Critchley, C. (2007). *Artificial Photosynthesis. En Basic Biology to Industrial Application*. Estados Unidos: John Wiley & Sons.

Cook, P. (2007). *Greenhouse Gas Technologies: A pathway to decreasing Carbon Intensity. En Collings, A. F., & Critchley, C. Artificial photosynthesis: from basic biology to industrial application* (p.p. 301-306), New Jersey, United States: John Wiley & Sons.

Dominguez-Juarez, J.L., Vallone, S., Lempel, A., Moocarme, M., Oh, J., Gafney, H.D. & Vuong, L.T. (2015). *Influence of solvent polarity on light-induced thermal cycles in plasmonic nanofluids. Optica*, 2, 447-453, doi: 10.1364/OPTICA.2.000447

Domínguez-Juárez, J. L., Quintero-Torres, R., Cardoso-Duarte, M. A. Quiroz-Juárez, Aragón J. L. Villatoro, J. (2023b). *Unveiling colorless liquids via photothermal-induced diffraction patterns*, Accepted manuscript status *Nature Research Journal*, COMMSPHYS-22-1198A, *Communications Physics*. doi: 10.1088/1612-202X/acb7f2

Domínguez-Juárez, J. L., Quintero-Torres, R., Cardoso-Duarte, M. A., Quiroz-Juárez, M. A., Aragón, J. L., & Villatoro, J. (2023c). *Optical signatures of liquids*. *Optics and Photonics News*, 34(12), 44. <https://doi.org/10.1364/OPN.34.12.000020>

Domínguez-Juárez, J. L., Quiroz-Juarez, M., Aragón, J., Quintero-Bermúdez, R. & Quintero-Torres, R. (2023a). *Complete numerical description of the laser-induced thermal profile in a liquid, to explain complex self-induced diffraction patterns*. doi: 0.48550/arXiv.2208.06489

Dutta, A., Rahim, A. A., Chakraborty, A., & Bandyopadhyay, S. (2014). *A review on the performance of different absorbents for carbon dioxide capture from flue gas*. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 16(3), 447-460. doi: 10.1007/s10098-013-0646-2

El-Kashef, H. (2000). *The necessary requirements imposed on polar dielectric laser dye solvents*. *Physica B: Condensed Matter*, 279(4), 295–301. doi:10.1016/s0921-4526(99)00856-x

Filichkina, V. A., Abroskin, A. G., Barbalat, Y. A., Golovko, I. V., Proskurnin, M. A., & Savostina, V. M. (1993). *Thermal lens spectrometry in aqueous systems*. *Journal of Analytical Chemistry*, 48, 269–275.

Franko, M., & Tran, C. D. (1989). *Thermal lens spectrometry of liquids*. *Analytical Chemistry*, 61, 1660–1664. <https://doi.org/10.1021/ac00189a025>

Gordon, J. P., Leite, R. C. C., Moore, R. S., Porto, S. P. S., & Whinnery, J. R. (1964). *Long-transient effects in lasers with inserted liquid samples*. *Bulletin of the American Physical Society*, 2, 501.

Gust, D., Moore, T. A., & Moore, A. L. (2009). *Solar Fuels via Artificial Photosynthesis*. *Accounts of Chemical Research*, 42(12), 1890–1898. doi:10.1021/ar900209b

Hale, G. (2018). *Mares ácidos: ¿Cómo el dióxido de carbono está cambiando los océanos*.

Recuperado de:

[https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwjz6\\_1qsH\\_AhVnDkQIHffsDKIQFnoECCUQAQ&url=https%3A%2F%2Fwww.acs.org%2Fcontent%2Fdam%2Facsorg%2Feducation%2Fresources%2Fhighschool%2Fchemmatters%2Fissues%2F2017-2018%2Ffebruary2018%2Ffeb2018-spanish-acidic-seas.pdf&usg=AOvVaw1ViS5Su9YwwLyrOcQeEySJ](https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwjz6_1qsH_AhVnDkQIHffsDKIQFnoECCUQAQ&url=https%3A%2F%2Fwww.acs.org%2Fcontent%2Fdam%2Facsorg%2Feducation%2Fresources%2Fhighschool%2Fchemmatters%2Fissues%2F2017-2018%2Ffebruary2018%2Ffeb2018-spanish-acidic-seas.pdf&usg=AOvVaw1ViS5Su9YwwLyrOcQeEySJ)

Hikita, H., Asai, S., Katsu, Y., & Ikuno, S. (1979). Absorption of carbon dioxide into aqueous monoethanolamine solutions. *AIChE journal*, 25(5), 793-800. Doi: 10.1002/aic.690250507

Ho, W., Birnbaum, G., & Rosenberg, A. (1971). Far-Infrared Collision-Induced Absorption in CO<sub>2</sub>. I. Temperature Dependence. *The Journal of Chemical Physics*, 55(3), 1028–1038. doi:10.1063/1.1676181

Huang, C.-P. (2003). *Chemical and physical processes of water and pollutants*. Estados Unidos: Wiley.

Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). (2023). *Climate Change 2023: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* (H. Lee & J. Romero, Eds.). IPCC. <https://doi.org/10.59327/IPCC/AR6-9789291691647>

International Energy Agency (IEA). (2021). *Energy Efficiency 2021*. Recuperado de: <https://www.iea.org/reports/energy-efficiency-2021>

Loeb, N. G., Thorsen, T. J., Kato, S., & Myhre, G. (2025). Emerging hemispheric asymmetry of Earth's radiation. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 122(40), e2511595122. <https://doi.org/10.1073/pnas.2511595122>

Meza-Arroyo, J., Valdés-Hernández, J., Domínguez-Juárez, J. L., & Quintero-Torres, R. (2024). DLS homemade setup: reviewing first and second-order coherence and autocorrelation concepts of a light source in the context of nanoparticle sizes synthesized by PLAL. *Scripta*. <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad664e>

Mondal, M. K., Halder, G., & Bandyopadhyay, S. (2016). Absorption of carbon dioxide in water: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 55, 1-11. Doi: 10.1016/j.rser.2015.10.051

Moocarme, M., Domínguez-Juárez, J. L., & Vuong, L. T. (2014). Ultra-low-intensity magneto-optical and mechanical effects in metal nanocolloids. *Nano Letters*, 14(3), 1178–1183. <https://doi.org/10.1021/nl4039357>

Möller, F. (1963). On the influence of changes in the CO<sub>2</sub> concentration in air on the radiation balance of the Earth's surface and on the climate. *Journal of Geophysical Research*, 68(13), 3877–3886. doi:10.1029/jz068i013p03877

Navidi, W. (2006). *Estadística para ingenieros* (No. 519.5 N325). McGraw Hill Interamericana.  
Recuperado de: <https://dokumen.pub/estadistica-para-ingenieros-y-cientificos-9701056299.html>

Norman J. Dovichi & Stephen E. Bialkowski (1987) *Thermo-Optical Spectrophotometries in Analytical Chemistry*, *C R C Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 17:4, 357-423, DOI: 10.1080/10408348708542799

Proskurnin M.A. (2014). *Photothermal spectroscopy*. In M. Baudelet (Ed.), *Laser spectroscopy for sensing: fundamentals, techniques and applications* (Ch. 11). Woodhead Publishing

Proskurnin, M. A., Volkov, D. S., Gor'kova, T. A., Bendrysheva, S. N., Smirnova, A. P., & Nedosekin, D. A. (2015). *Advances in thermal lens spectrometry*. *Journal of Analytical Chemistry*, 70(3), 249–276. <https://doi.org/10.1134/S1061934815030168>

Ready, J. F. (1965). *Effects due to absorption of laser radiation*. *Journal of Applied Physics*, 36(2), 462-468.

Rivière, P., & Soufiani, A. (2012). *Updated band model parameters for H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> and CO radiation at high temperature*. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(13-14), 3349–3358. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.03.019

Samanta, A., & Bandyopadhyay, S. S. (2009). *Absorption of carbon dioxide into aqueous solutions of piperazine activated 2-amino-2-methyl-1-propanol*. *Chemical Engineering Science*, 64(6), 1185-1194. Doi: 10.1016/j.ces.2008.10.049

Sander, R. (2023). *Compilation of Henry's law constants (version 5.0.0) for water as solvent*. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 23. <https://doi.org/10.5194/acp-23-10901-2023>

Shrestha, S., Domínguez-Juárez, J. L., & Vuong, L. T. (2017). *Light-induced electrohydrodynamic instability in plasmonically absorbing gold nanofluids*. *Physical Review Fluids*, 2(6), 064201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.2.064201>

Simon M Colcombe; Richard D Snook. (1999). *Thermal lens investigation of the temperature dependence of the refractive index of organo–aqueous solutions*. 155–161. doi:10.1016/s0003-2670(99)00163-4

Spectra Physics. (2023). Spirit® high power femtosecond lasers. Spirit® Femtosecond Laser. <https://www.spectra-physics.com/en/f/spirit-femtosecond-laser>

Stumm, W., & Morgan, J. (1996). *Aquatic Chemistry: Chemical Equilibria and Rates in Natural Waters*. Wiley.

Tran, C. D., & Van Fleet, T. A. (1988). Enhancement of thermal lens sensitivity using surfactants. *Analytical Chemistry*, 60, 2478–2481. <https://doi.org/10.1021/ac00173a020>

U.S. National Library of Medicine. (2022). Carbon dioxide. Recuperado el 21 de abril de 2023, de <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/carbon-dioxide>

Universidad de Murcia (2006). *Apuntes de teledetección*. Recuperado de: <https://www.um.es/geograf/sigmur/teledet/tema02.pdf>

Valdés, J., Domínguez-Juárez, J. L., Nava, R., Cuán, Á., & Cortés-Romero, C. M. (2021). Turbulence enhancement and mixing analysis for multi-inlet vortex photoreactor for CO<sub>2</sub> reduction. *Processes*, 9(12), 2237. <https://doi.org/10.3390/pr9122237>

Valdés, J., Domínguez-Juárez, J. L., Nava, R., Cuán, Á., & Cortés-Romero, C. M. (2022). Geometry optimization for multi-inlet vortex photoreactor for CO<sub>2</sub> reduction. *Revista Mexicana de Física*, 68(2), 020601. <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.68.020601>

Valdés-Hernández, J., Domínguez-Juárez, J. L., Nava-Mendoza, R., Cortés-Romero, C. M., Quintero-Torres, R., & Cuán-Hernández, Á. (2024). Photocatalytic enhancement for CO<sub>2</sub> reduction using Au nanoparticles supported on Fe-doped SrTiO<sub>3</sub>-δ perovskite. *Solar RRL*, 8(9), 2300968. <https://doi.org/10.1002/solr.202300968>

Valdés-Hernández, J., Domínguez-Juárez, J. L., Quiroz-Juárez, M. A., & Quintero-Torres, R. (2025a). Role of surface energy in thermal self-diffraction oscillations. *Physics of Fluids*, 37, 072113. <https://doi.org/10.1063/5.0268121>

Valdés-Hernández, J., Domínguez-Juárez, J. L., Torres-Solís, C. A., Quiroz-Juárez, M. A., & Quintero-Torres, R. (2025b). Phase-retrieval of thermal lenses from an intensity-only reconstruction IA algorithm. *Journal of Physics: Photonics*, 8(1). <https://doi.org/10.1088/2515-7647/ae46ff>

Valdés-Hernández, J., Quiroz-Juárez, M. A., Domínguez-Juárez, J. L., & Quintero-Torres, R. (2025c). *Hamiltonian phase reconstruction enables quantitative prediction of diffraction in inhomogeneous media*. *Journal of Physics: Photonics*. <https://doi.org/10.1088/2515-7647/ae4ce0>

Xu, B., & Li, Z. (2015). *CO<sub>2</sub> capture by aqueous absorption and adsorption: A review*. *Frontiers of Chemical Science and Engineering*, 9(3), 303-317. doi: 10.1007/s11705-015-1511-7

## 15. Anexos

### 15.1. Estudio adicional del funcionamiento del dispositivo CARBOMED a distintas presiones.

Antes de realizar una medida experimental, se tiene que verificar el funcionamiento correcto del sistema automatizado. Para este propósito se realizó un experimento sencillo, descrito en la última sección de la metodología.

En la Figura 11.6.c. el volumen de CO<sub>2</sub> inyectado se grafica en función de la presión teórica que experimenta la punta de la aguja de inyección. La figura incluye dos grupos de datos, correspondientes a las dos probetas utilizadas, y muestra que el volumen inyectado no coincidía con el valor configurado en el sistema de inyección de CO<sub>2</sub>. Analizando a mayor detalle vemos valores menores a 2 centímetros cúbicos por pulso, e incluso una tendencia que indica un menor volumen inyectado conforme aumenta la presión.

Al comparar ambas configuraciones, se observó una diferencia notable: en la probeta grande, el volumen desplazado correspondía aproximadamente al 50 % del valor esperado, mientras que en la probeta pequeña alcanzaba alrededor del 75 %, más cercano al valor configurado. Estos resultados evidencian una relación entre la presión en la punta de la aguja de inyección y la cantidad de gas efectivamente expulsado.

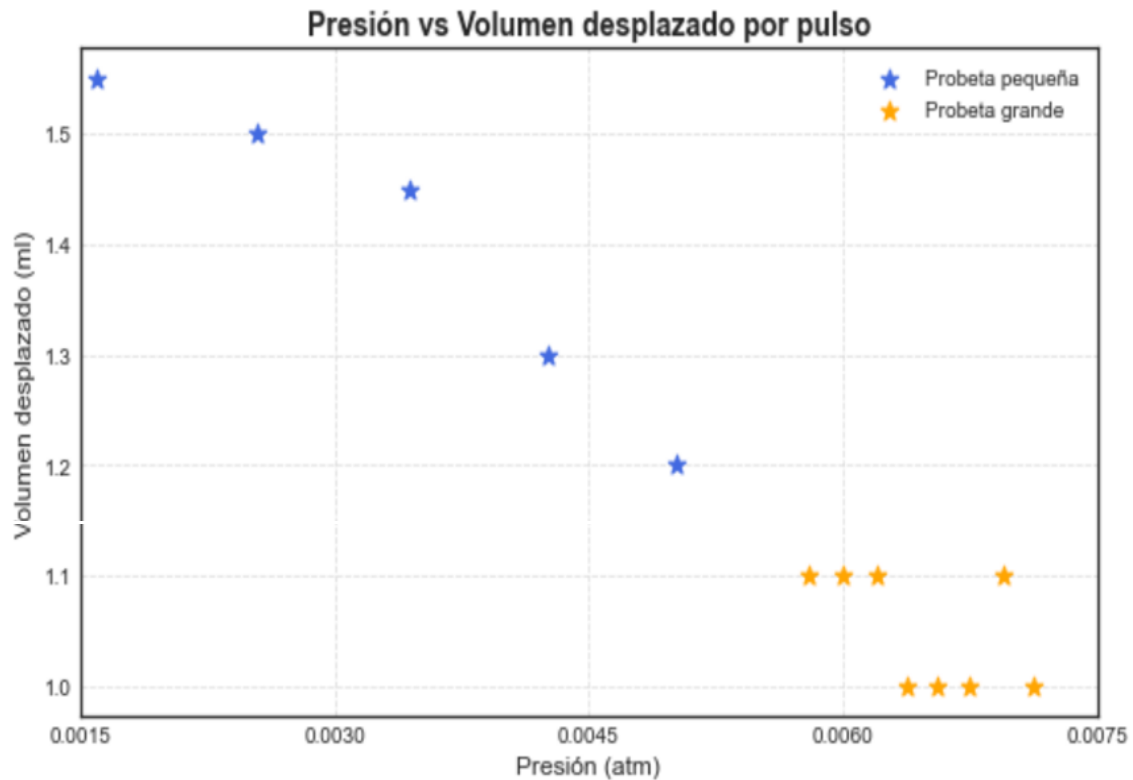


Figura 11.6.c. Volumen de gas inyectado en función de la presión.

No obstante, dado que el flujo de  $\text{CO}_2$  no se mantuvo constante ni predecible con suficiente precisión, se concluyó que en futuras mediciones será necesario monitorear continuamente la presión y calcular a partir de ella el volumen de gas inyectado, con el fin de mejorar la exactitud de las estimaciones.