

**CONSTRUCCIÓN DE UNA BASE DE DATOS ESPECTRALES DE REFERENCIA
MEDIANTE ATR-FTIR, PARA LA IDENTIFICACIÓN DE SUSTANCIAS CONTROLADAS
EN COLOMBIA**

ELKIN MAURICIO PINZÓN LEÓN



**UNIVERSIDAD DE PAMPLONA
FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
PAMPLONA, COLOMBIA
2024**

**CONSTRUCCIÓN DE UNA BASE DE DATOS ESPECTRALES DE REFERENCIA
MEDIANTE ATR-FTIR, PARA LA IDENTIFICACIÓN DE SUSTANCIAS CONTROLADAS
EN COLOMBIA**

ELKIN MAURICIO PINZÓN LEÓN

Trabajo de investigación presentado como requisito para optar al título de Químico (a)

Tutores

AMANDA LUCÍA CHAPARRO GARCÍA

Química, M.Sc., PhD.

UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

JOSÉ MANUEL MÉNDEZ HERNÁNDEZ

Ingeniero Químico, Magíster en Química

FISCALÍA GENERAL DE LA NACIÓN



**UNIVERSIDAD DE PAMPLONA
FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
PAMPLONA, COLOMBIA**

2024

DEDICATORIA

Esta investigación la dedico especialmente a mi hija Marie, por despertar en mí la necesidad de ser mi mejor versión.

A mi compañera de vida Claudia, por brindarme apoyo incondicional en todo mi proceso, a pesar de los momentos difíciles.

A mis padres Rosmira León y Mauricio Pinzón, por brindarme apoyo y ánimo durante toda mi carrera, resaltando el gran esfuerzo y dedicación que realizaron para que yo pudiese cumplir esta nueva meta. También a mis hermanos Jhairt y Rubén por su apoyo, palabras de aliento y motivación en todo momento.

Último, pero no menos esencial a mis amigos que durante mi paso por la academia hasta este punto, me brindaron su apoyo y ánimo para culminar esta etapa de mi vida.

AGRADECIMIENTOS

Principalmente a Dios por concederme la salud y la sabiduría para realizar esta investigación.

Por otra parte, quiero extender mi agradecimiento a mis tutores, la Doctora Amanda Lucía Chaparro García y el Ingeniero José Manuel Méndez Hernández, por brindarme su guía, sabiduría y demás factores que permitieron la realización de este trabajo de grado. Así mismo agradezco al cuerpo docente que, con su vocación por la enseñanza, nutrieron mis conocimientos a lo largo de la carrera, base que me permitió culminar con esta etapa formativa. También a Daniela Mora por su colaboración como la analista 2, que fue fundamental para cumplir con uno de los objetivos principales de esta investigación.

Por último, pero no menos importante, quiero agradecer al laboratorio de química de la Fiscalía General de la Nación por confiar la investigación realizada, también a los laboratorios de Biocalorimetría y Control de Calidad de la Universidad de Pamplona, por facilitar la toma de muestras en el equipo infrarrojo y en la preparación de las mismas.

CONTENIDO

DEDICATORIA	3
AGRADECIMIENTOS.....	4
LISTA DE TABLAS	7
LISTA DE FIGURAS.....	8
RESUMEN.....	11
ABSTRACT	12
INTRODUCCIÓN.....	13
1. MARCO REFERENCIAL.....	14
1.1. SUSTANCIAS CONTROLADAS.....	14
1.1.1. PRECURSORES	14
1.1.2. SUSTANCIAS QUÍMICAS CONTROLADAS	15
1.1.3. COCAÍNA.....	18
1.1.3.1. SUSTANCIAS QUÍMICAS USADAS DURANTE LA FABRICACIÓN DE COCAÍNA.....	19
1.2. ESPECTROMETRÍA INFRARROJA CON TRANSFORMADA DE FOURIER, CON ACCESORIO DE REFLECTANCIA TOTAL ATENUADA (ATR-FTIR).	22
1.3. ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO	24
1.3.1. ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (PCA)	25
1.3.2. ANÁLISIS JERÁRGICO DE CONGLOMERADOS (HCA)	26
1.4. BASE DE DATOS ESPECTRALES.....	28
1.5. ANÁLISIS R&R (REPRODUCIBILIDAD Y REPETIBILIDAD).....	29
1.5.1. PRECISIÓN	30
2. OBJETIVOS	31
2.1. OBJETIVO GENERAL.....	31
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	31
3. METODOLOGÍA.....	32
3.1. MUESTREO	32
3.2. REACTIVOS.....	32
3.3. EQUÍPOS, INSTRUMENTOS Y MÉTODOS.....	33
3.4. CALIBRACIÓN DEL EQUIPO CON PELÍCULA DE POLIESTIRENO.....	33
3.5. ANÁLISIS DE SUSTANCIAS PARA DETERMINACIÓN DEL PERFIL QUÍMICO Y GENERACIÓN DE LA BASE DE DATOS ESPECTRALES.....	34
3.5.1. PREPARACIÓN DE SALES DE AMONIO PARA EL ANÁLISIS DE MUESTRAS CORROSIVAS.	37
3.6. ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO EN MUESTRAS DE CEMENTO, THINNER Y GASOLINA.....	38

3.7. ANÁLISIS DE REPETIBILIDAD Y REPRODUCIBILIDAD.....	39
4. RESULTADOS Y ANÁLISIS	42
4.1. CALIBRACIÓN CON PELÍCULA DE POLIESTIRENO	42
4.2. ANÁLISIS DE SUSTANCIAS QUÍMICAS CONTROLADAS PARA DETERMINACIÓN DEL PERFIL QUÍMICO Y GENERACIÓN DE LA BASE DE DATOS ESPECTRALES.....	44
4.2.1. PREPARACIÓN DE SALES DE AMONIO PARA ANÁLISIS DE SUSTANCIAS CORROSIVAS.....	69
4.3. ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO EN MUESTRAS DE CEMENTO, THINNER Y GASOLINA.....	72
4.4. ANÁLISIS DE REPETIBILIDAD Y REPRODUCIBILIDAD.	82
CONCLUSIONES	88
RECOMENDACIONES.....	89
BIBLIOGRAFÍA.....	90
ANEXOS.....	107

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Sustancias controladas en Colombia, según la resolución 0001 del 8 de enero del 2015.	17
Tabla 2. Límites mínimos de control mensual de las sustancias químicas controladas en Colombia.	18
Tabla 3. Reactivos dispuestos por la Fiscalía General de la Nación. (Fuente: Autor)	32
Tabla 4. Parámetros de medición mediante ATR-FTIR de sustancias químicas controladas. (Fuente: Autor).....	36
Tabla 5. Rangos para el cálculo del área bajo la curva de las SQC a partir de su información espectral. (Fuente: Autor)	40
Tabla 6. Asignaciones del poliestireno.	43
Tabla 7. Asignaciones para el espectro ATR-FTIR del metanol.	45
Tabla 8. Asignaciones al espectro ATR-FTIR del Alcohol isopropílico.	46
Tabla 9. Asignaciones al espectro ATR-FTIR del Butanol.....	48
Tabla 10. Asignaciones al espectro ATR-FTIR de la Acetona.	49
Tabla 11. Asignaciones del espectro de Isobutil metil cetona.	50
Tabla 12. Asignaciones para el espectro ATR-FTIR de la metil etil cetona.	52
Tabla 13. Tabla de asignaciones del espectro ATR-FTIR de Acetatos.....	54
Tabla 14. Tabla de asignaciones en primera derivada para diferenciación de acetatos (Fuente: Acetatos)	56
Tabla 15. Asignaciones para el espectro ATR-FTIR del cloroformo.	57
Tabla 16. Asignaciones para el espectro ATR-FTIR del permanganato de potasio.....	58
Tabla 17. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del tolueno.	60
Tabla 18. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del metabisulfito de sodio.....	61
Tabla 19. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del cloruro de calcio.	63
Tabla 20. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del carbonato de sodio.....	65
Tabla 21. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del ACPM.....	67
Tabla 22. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del Disolvente No. 1A.....	68
Tabla 23. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del Sulfato de amonio.	70
Tabla 24. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del cloruro de amonio.....	72
Tabla 25. Compuestos químicos del cemento (CHIPATECUA, 2022).....	72
Tabla 26. Tabla ANOVA de dos factores con interacción. (Fuente: Autor)	83
Tabla 27. Componentes de la varianza. (Fuente: Autor)	86
Tabla 28. Evaluación del sistema de medición. (Fuente: Autor)	87

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Precursores químicos y productos finales (Fuente: Autor).	15
Figura 2. Obtención de Metcatinona con el uso de precursor y sustancias químicas (Fuente: Autor).....	16
Figura 3. Erythroxylum coca y estructura de la benzoilmetilecgonina (ÍNaturalistEc, 2023; UNODC, 2012).	18
Figura 4. Diagrama de flujo de la obtención de clorhidrato de cocaína a partir de las hojas de coca (UNODC, 2012).	21
Figura 5. Ilustración del funcionamiento de un sistema de Reflectancia Total Atenuada (ATR) (Mohamed et al., 2017).	23
Figura 6. Gráfica de puntuaciones de PCA aplicado en la identificación de trazas de lubricantes sexuales (Nimi et al., 2023).....	25
Figura 7. Dendrograma de elementos traza en muestras de parabrisas de automóviles (Sharma et al., 2022).	27
Figura 8. Sustancia química controlada enviada por la Fiscalía General de la Nación. (Fuente: Autor).....	34
Figura 9. Montaje para el análisis ATR-FTIR de sustancias líquidas. (Fuente: Autor)	35
Figura 10. Preparación y análisis ATR-FTIR de sustancias sólidas, permanganato de potasio (izquierda), cloruro de calcio (derecha). (Fuente: Autor)	36
Figura 11. Preparación de cloruro de amonio. (Fuente: Autor).....	37
Figura 12. Analistas para el análisis R&R. (Fuente: Autor)	39
Figura 13. Código Matlab para la obtención del área bajo la curva de las sustancias químicas controladas (Rivera B, Diego et al., 2024).	41
Figura 14. Espectro ATR-FTIR del poliestireno. (Fuente: Autor)	42
Figura 15. Espectro ATR-FTIR del metanol (Fuente: Autor).....	44
Figura 16. Espectro ATR-FTIR del alcohol isopropílico. (Fuente: Autor)	46
Figura 17. Espectro ATR-FTIR del butanol. (Fuente: Autor).....	47
Figura 18. Espectro ATR-FTIR de la Acetona. (Fuente: Autor)	48
Figura 19. Espectro ATR-FTIR del metil isobutil cetona. (Fuente: Autor)	50
Figura 20. Espectro ATR-FTIR de la metil etil cetona. (Fuente: Autor).....	51
Figura 21. Espectro ATR-FTIR de Acetatos de primer orden y zoom en región de huella dactilar. (Fuente: Autor)	52
Figura 22. Estructuras de acetatos. (Fuente: Autor).....	53
Figura 23. Espectro ATR-FTIR primera derivada de acetatos. (Fuente: Autor)	55
Figura 24. Espectro ATR-FTIR del cloroformo. (Fuente: Autor)	57
Figura 25. Espectro ATR-FTIR del permanganato de potasio. (Fuente: Autor)	58
Figura 26. Espectro ATR-FTIR del tolueno. (Fuente: Autor).....	59
Figura 27. Espectro ATR-FTIR del metabisulfito de sodio. (Fuente: Autor)	60
Figura 28. Espectro ATR-FTIR del bisulfito de sodio. (Fuente: Autor).....	62
Figura 29. Espectro ATR-FTIR del cloruro de calcio. (Fuente: Autor)	63
Figura 30. Espectro ATR-FTIR del carbonato de sodio. (Fuente: Autor)	65
Figura 31. Espectro ATR-FTIR del ACPM. (Fuente: Autor)	66
Figura 32. Espectro ATR-FTIR del disolvente No. 1A. (Fuente: Autor)	67
Figura 33. Espectro ATR-FTIR del hexano. (Fuente: Autor).....	68
Figura 34. Espectro ATR-FTIR del Sulfato de amonio. (Fuente: Autor).....	70
Figura 35. Espectro ATR-FTIR del Cloruro de amonio. (Fuente: Autor)	71

Figura 36. Espectro ATR-FTIR de cementos. (Fuente: Autor).....	73
Figura 37. Análisis de Componentes Principales (PCA) de cementos con información espectral de la primera derivada. (Fuente: Autor)	75
Figura 38. Dendrograma para muestras de cemento con información espectral de primer orden. (Fuente: Autor).....	76
Figura 39. Espectro ATR-FTIR de muestras de gasolina. (Fuente: Autor)	78
Figura 40. Análisis de Componentes Principales (PCA) en muestras de Gasolina con la información espectral de la primera derivada. (Fuente: Autor)	79
Figura 41. Dendrograma del primer orden en gasolinas. (Fuente: Autor).....	80
Figura 42. Espectro ATR-FTIR de las muestras de thinner. (Fuente: Autor)	81
Figura 43. Gráfica de variación en la totalidad de repeticiones de cada sustancia. (Fuente: Autor).....	83
Figura 44. Interacción del valor promedio para cada sustancia por cada analista. (Fuente: Autor).....	84
Figura 45. Gráfica de componentes de variación. (Fuente: Autor)	85
Figura 46. Interacción de la medida (área) por cada Analista. (Fuente: Autor).....	86

LISTA DE ABREVIATURAS

Abreviatura	Término
UNODC	Oficina de las Naciones Unidas Contra las Drogas y el Delito
CNE	Código Nacional de Estupefacientes
JIFE	Junta Internacional de Fiscalización de Estupefacientes
SQC	Sustancias Químicas Controladas
PCA	Análisis de Componentes Principales
PC	Componente Principal
FTIR	Espectroscopia con Transformada de Fourier
ATR	Reflectancia Total Atenuada
HCA	Análisis Jerárquico de Conglomerados
R&R	Repetibilidad y Reproducibilidad

RESUMEN

En Colombia, la producción de drogas ilícitas sigue siendo un factor de alto impacto en el conflicto interno del país, lo que ha obligado a las autoridades a intensificar los controles de sustancias químicas controladas, las cuales son fundamentales durante la síntesis de sustancias psicoactivas. De acuerdo a lo anterior, en esta investigación, realizada en conjunto con la Fiscalía General de la Nación, se creó una base de datos espectrales de referencia para sustancias químicas controladas, constatadas en la resolución 0001 del 8 de enero del 2015 en el territorio nacional, todo con la finalidad de asentar una base teórica sobre la información espectral de cada sustancia analizada mediante ATR-FTIR. En primer lugar, se tomaron muestras proporcionadas por la Fiscalía y se analizaron con ATR-FTIR para determinar el perfil químico de cada sustancia, así mismo se utilizaron herramientas multivariantes como PCA y HAC para determinar diferencias entre muestras de tipo comercial; por último, se realizó un análisis R&R para evaluar la variabilidad en los espectros de las sustancias estudiadas al cambiar de analista. En los resultados obtenidos resalta la base de datos espectrales, la cual se soportó con un perfilamiento químico de cada sustancia, mostrando las asignaciones características de cada sustancia química analizada. También se observó la discriminación de muestras de cemento, thinner y gasolina de acuerdo a su información espectral de primer orden ya que presentó la mayor explicación de la varianza; para finalizar y dar fiabilidad estadística a la investigación, se encontró que en el estudio de variación de las medidas mediante el análisis R&R, el valor de contribución a la varianza del estudio (9,37 %) está por debajo del umbral del 10%.

Palabras Claves: ATR-FTIR, sustancias controladas, base de datos, reproducibilidad, repetibilidad.

ABSTRACT

In Colombia, the production of illicit drugs continues to be a factor with a high impact on the country's internal conflict, which has forced the authorities to intensify controls on controlled chemicals, which are fundamental during the synthesis of psychoactive substances. In accordance with the foregoing, this investigation, carried out in conjunction with the Office of the Attorney-General of the Nation, created a spectral reference database for controlled chemicals, as established in resolution 0001 of 8 January 2015 in the national territory, all in order to establish a theoretical basis on the spectral information of each substance analyzed by ATR-FTIR. First, samples provided by the Office of the Prosecutor were taken and analyzed with ATR-FTIR to determine the chemical profile of each substance, and multivariate tools such as PCA and HAC were used to determine differences between commercial samples; finally, an R&R analysis was performed to evaluate the variability in the spectra of the substances studied when changing analyst. In the results obtained highlights the spectral database, which was supported by a chemical profiling of each substance, showing the characteristic assignments of each chemical analyzed. The discrimination of cement, thinner and gasoline samples according to their first-order spectral information was also observed as it presented the greatest explanation for variance; to finalize and give statistical reliability to the research, it was found that in the study of variation of measures by R&R analysis, the value of contribution to the variance of the study (9.37%) is below the 10% threshold.

Keywords: ATR-FTIR, Controlled Substances, Database, Reproducibility, Repeatability.

INTRODUCCIÓN

En Colombia, la producción de drogas ilícitas sigue siendo un factor de alto impacto en el conflicto interno del país, lo que ha obligado a las autoridades a intensificar los controles de sustancias químicas controladas. Es por ello que, así como se han implementado medidas, como la erradicación de cultivos e incautaciones de estupefacientes (Presidencia de la República, 2024), también se han intensificado los controles intensivos, relacionados con incautaciones que tienen como objetivo principal las sustancias químicas controladas, que son de suma importancia durante la síntesis de drogas ilícitas (JIFE, 2018).

Bajo la dirección del Ministerio de Justicia y Derecho, se han desarrollado estrategias informativas y de control. Estas buscan identificar diversas sustancias químicas utilizadas en la producción y procesamiento de drogas, específicamente la cocaína en el territorio nacional. Lo afirmado se sustenta con la resolución 0001 del 8 de enero del 2015 del Consejo Nacional de Estupefacientes, la cual informa de los productos y sustancias químicas controladas usualmente empleadas durante la síntesis de cocaína y otras drogas, así como las penalizaciones, permisos y límites de control mínimo de estas sustancias (Consejo Nacional de Estupefacientes, 2015).

Gracias a las acciones implementadas por las autoridades, en los últimos 10 años se han incautado alrededor de 61 millones de litros y 18 millones de kilogramos de sustancias químicas destinadas según la inteligencia a la producción de estupefacientes (Armada de Colombia, 2023).

En base a lo anterior, se han derivado nuevos retos en los laboratorios de química de la Fiscalía General de la Nación, los cuales se enfocan en la tenencia de metodologías analíticas con alta fiabilidad, bajo costo y velocidad de análisis, ya que, con la información proporcionada, serán aplicables las sanciones de ley a quien esté implicado con dichas sustancias.

1. MARCO REFERENCIAL

1.1. SUSTANCIAS CONTROLADAS

Partiendo de la problemática que afronta Colombia actualmente con la producción y tráfico de estupefacientes, ha surgido la necesidad de intensificar los controles y el flujo de sustancias controladas o también conocidas como sustancias químicas esenciales, que tienen una finalidad directa en la obtención de drogas mediante síntesis química (Espíndola, 2023).

Excepto en el caso del cannabis o marihuana y sus derivados, la producción de casi todas las drogas ilícitas implica el uso de productos químicos para su transformación hacia su forma final, ya sea como drogas "orgánicas" o como el resultado directo de una síntesis química entre diferentes componentes (conocidas como drogas sintéticas o "de diseño"). Tomemos, por ejemplo, la cocaína, un alcaloide que se encuentra en estado puro en la hoja de coca y que, a través de un proceso que involucra varios productos químicos (como ácido sulfúrico, acetona, permanganato de potasio, etc.), se extrae hasta alcanzar su forma final, conocida como clorhidrato de cocaína (Cienca, 2017).

La fabricación de drogas es imposible sin la presencia de estas sustancias químicas, las cuales son necesarias para obtener otro producto mediante una reacción química, actuando como un sustrato en etapas posteriores para la elaboración de otro compuesto diferente al original (Parra & Duffau, 2011). Dentro del marco de sustancias y productos químicos utilizados en la síntesis de estupefacientes, se tiene en cuenta que existen dos grupos de sustancias.

1.1.1. PRECURSORES

Son sustancias que son ampliamente utilizadas en la fabricación y síntesis de drogas ilícitas, según la interpretación de Cunningham y colaboradores, los precursores se diferencian de las sustancias químicas esenciales en el hecho de que estos, otorgan parte de su estructura química al producto final (Cunningham et al., 2013). Un ejemplo del uso de precursores está relacionado con el uso de la efedrina y pseudoefedrina en la producción de ATS (Sustancias de Tipo Anfetamínico) como la metanfetamina, MDMA (éxtasis) droga del amor y demás sustancias que se observan en la Figura 1.

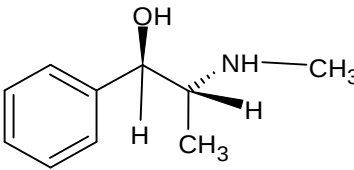
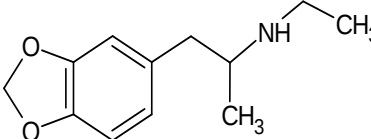
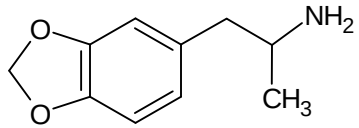
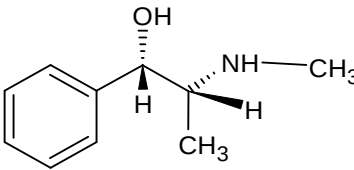
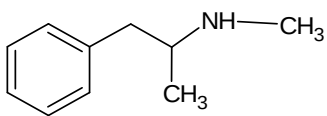
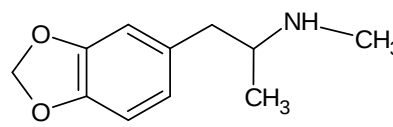
PRECURSORES	PRODUCTO FINAL	
 (+)- Pseudoefedrina	 3,4- Metilendioxitimetilanfetamina MDEA, 3,4-MDEA	 3,4-Metilendioxi-anfetamina Droga del amor
 (-)- Efedrina	 Metanfetamina	 3,4-Metilendioxi-anfetamina MDMA

Figura 1. Precursores químicos y productos finales (Fuente: Autor).

1.1.2. SUSTANCIAS QUÍMICAS CONTROLADAS

Este tipo de sustancias químicas son fundamentales para la síntesis de estupefacientes, que se involucran como solventes, reactivos, catalizadores, oxidantes, purificadores y demás fases durante la fabricación de drogas ilícitas. En la Figura 2 se aprecia el proceso de síntesis de Metcatinona a partir de su precursor químico Efedrina, que, mediante un proceso de oxidación, el cual es dependiente del uso de sustancias químicas esenciales, que en dicho caso son el Permanganato de potasio y el Ácido sulfúrico (Belhadj-Tahar & Sadeg, 2005).

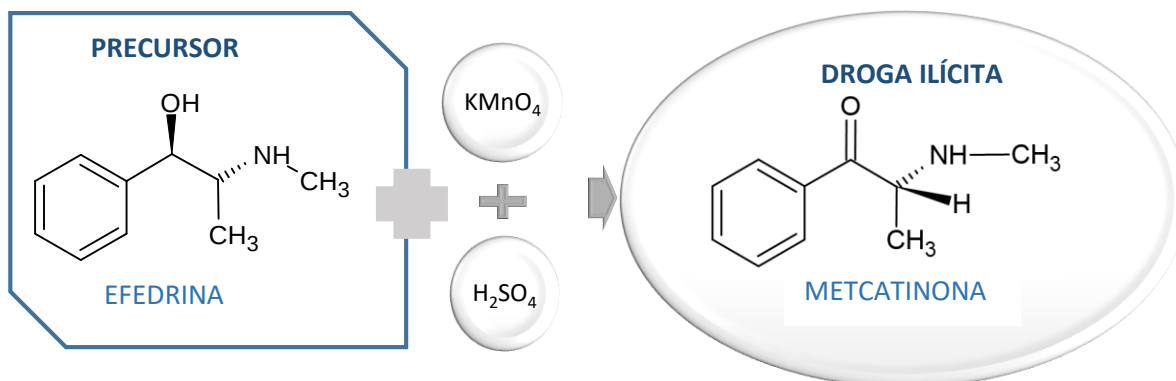


Figura 2. Obtención de Metcatinona con el uso de precursor y sustancias químicas
(Fuente: Autor).

Partiendo de la importancia de las SQC en la síntesis de drogas ilícitas, la comunidad internacional reconoce la importancia de las acciones de control de estos productos químicos como una herramienta fundamental en la lucha contra el narcotráfico. Este control, junto con otras medidas tiene como objetivo evitar directamente la producción de drogas ilícitas. Es importante destacar que el movimiento de estas sustancias no solo es completamente ilegal, sino que también es esencial en la fabricación de numerosos productos de consumo diario, como alimentos, perfumes, pinturas, maquinaria, entre otros. Imponer restricciones excesivas al libre tráfico de estas sustancias podría tener graves repercusiones en la economía de empresas y países (UNODC, 2023).

De acuerdo con lo estipulado en la resolución 0001 del 8 de enero del 2015 del Consejo Nacional de Estupefacientes, en el artículo 4 del capítulo II, muestra claramente las 33 sustancias químicas controladas en Colombia (Consejo Nacional de Estupefacientes, 2015), que usualmente son utilizadas en cada una de las fases durante la síntesis de estupefacientes, como se observa en la Tabla 1.

Tabla 1. Sustancias controladas en Colombia, según la resolución 0001 del 8 de enero del 2015.

No.	Sustancia Controlada	No.	Sustancia Controlada
1	Aceite Combustible para Motor (A.C.P.M)	18	Diacetona alcohol
2	Acetato de butilo	19	Dióxido de manganeso
3	Acetato de etilo	20	Disolvente No.1 y 1A
4	Acetato de isobutilo	21	Disolvente No. 2
5	Acetato de isopropilo	22	Éter etílico
6	Acetato de n-propilo	23	Gasolina para motor
7	Acetona	24	Hexano
8	Ácido clorhídrico	25	Hidróxido de sodio
9	Ácido sulfúrico	26	Manganato de potasio
10	Alcohol isopropílico	27	Metanol
11	Amoniaco	28	Metabisulfito de sodio
12	Anhídrido acético	29	Metil etil cetona
13	Butanol	30	Metil isobutil cetona
14	Carbonato de sodio	31	Permanganato de potasio
15	Cemento	32	Thinner
16	Cloroformo	33	Tolueno
17	Cloruro de calcio		

En el artículo 6 del capítulo 2 se encuentran de igual forma, los límites de control establecidos para las sustancias controladas mencionadas en la Tabla 1. Dichos límites se encuentran en la Tabla 2.

Tabla 2. Límites mínimos de control mensual de las sustancias químicas controladas en Colombia. (Fuente: resolución 0001 del 8 de enero del 2015)

Sustancia química controlada	Límite mínimo de control mensual
Anhídrido acético, Ácido clorhídrico, Ácido sulfúrico y Permanganato de potasio.	Cualquier cantidad
Thinner	110 galones americanos
Cemento	A partir de 2 toneladas
Gasolina y A.C.P.M	220 galones americanos
Demás sustancias químicas controladas	5 kilogramos o 5 litros según el estado físico de la sustancia.

Partiendo del hecho de que la cocaína es la droga ilícita más producida en el territorio nacional, teniendo en cuenta que para el 2023 se incautaron alrededor de 739,5 toneladas de clorhidrato de cocaína (Manjarrés, 2024), las autoridades competentes y los laboratorios de química forense se aseguran de compilar la mayor información posible sobre el proceso y sustancias implicadas en la fabricación de esta droga.

1.1.3. COCAÍNA

La benzoilmetilecgonina, conocida como cocaína (Figura 3), es un metabolito secundario generado por el arbusto de coca (Erythroxylon Coca o Erythroxylon Novogranatense), nativo de América del Sur. Esta planta produce este metabolito como una sustancia defensiva contra los depredadores (Ramírez A, 2017).

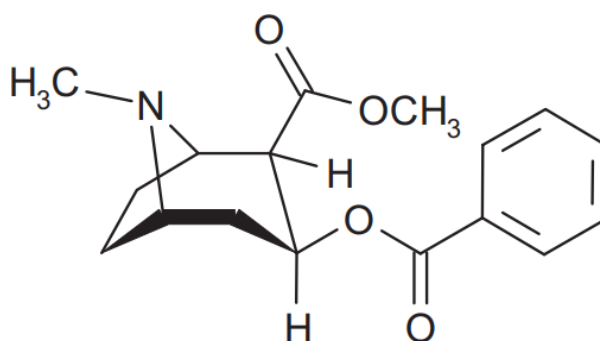


Figura 3. Erythroxylum coca y estructura de la benzoilmetilecgonina (ÍNaturalistEc, 2023; UNODC, 2012).

La cocaína es clasificada como un alcaloide y se encuentra en la planta junto a otros alcaloides como la benzoilecgonina, la metilecgonina y la ecgonina. En cuanto a su estructura química, esta sustancia psicoactiva es un metil éster de la benzoilecgonina. Su nombre según la IUPAC es (1R, 2R, 3S, 5S)-3-(benzoiloxi)-8-metil-8-azabicyclo [3.2.1] octano-2-carboxilato de metilo, y su fórmula química es $C_{17}H_{21}NO_4$ (PubChem, 2024).

1.1.3.1. SUSTANCIAS QUÍMICAS USADAS DURANTE LA FABRICACIÓN DE COCAÍNA

Según el documento "Recommended methods for the Identification and Analysis of Cocaine in Seized Materials", la producción ilegal de cocaína puede clasificarse en dos métodos principales. Uno de ellos es la extracción de la sustancia directamente de las hojas de la planta, donde se encuentra de forma natural, en la cual se va a hacer énfasis en este documento y la segunda como síntesis química a partir del alcaloide como precursor.

OBTENCIÓN DE COCAÍNA A PARTIR DE LAS HOJAS DE COCA

En líneas generales, para la obtención de cocaína a partir de la hoja de coca, se consideran tres pasos fundamentales:

- Obtención de la pasta base.
- Purificación de la pasta base y obtención de la cocaína base.
- Obtención del clorhidrato de cocaína.

➤ PRIMER PASO: Obtención de la pasta base a partir de las hojas de coca

- **Extracción Alcalina:** En primer lugar, las hojas de coca, secas y frescas, se humedecen en una solución alcalina para luego triturarla durante 4 a 6 horas con la finalidad de convertir la cocaína en una forma insoluble en agua. Cabe resaltar que la cocaína en la hoja se presenta como tanato de cocaína. Para la extracción inicial se usan por lo general Hidróxido de sodio, Cemento, carbonato de calcio, Hidróxido de amonio (agua amoniacal) entre otros.

Las hojas de coca humedecidas nuevamente son maceradas en gasolina, A.C.P.M u otro solvente orgánico (tolueno, thinner, solventes alifáticos, etc), el cual logra disolver la cocaína y esta queda como base libre de cocaína y la extrae, además de la hoja de coca extrae otros alcaloides distintos a la cocaína. La solución de gasolina se mezcla con ácido sulfúrico diluido, para de esta forma convertir la cocaína y los alcaloides en forma de

sulfatos, los cuales presentan solubilidad en la solución ácida donde se retienen. En este caso es empleado comúnmente el ácido sulfúrico debido a que presenta baja volatilidad y es un ácido fuerte, lo cual lo hace más fácil de manejar a diferencia del ácido clorhídrico, nítrico o fosfórico.

A la solución ácida resultante se adiciona hidróxido de amonio. El cual convierte el sulfato de cocaína en la pasta base, que posee insolubilidad en agua y precipita en la solución, siendo la filtración el medio de separación de la fase líquida y el sólido resultante (Pasta de Coca) también conocido como “sulfato” teniendo un contenido aproximado de 50 % de cocaína.

- **Extracción ácida:** Las hojas de coca son generalmente tratadas con soluciones de ácido sulfúrico, que convierte la base libre de cocaína en sulfato. Dicha mezcla se filtra y se adiciona cal o carbonatos, resultando la precipitación de la pasta cruda de coca, esta misma se disuelve en gasolina y la fase orgánica se trata según la metodología anteriormente expuesta.

➤ **SEGUNDO PASO: Obtención de la Pasta Base de Cocaína (PBC)**

Para la consecución de la base de cocaína, se toma la pasta de coca obtenida en el primer paso y se disuelve en ácido sulfúrico diluido, lo que permite que la cocaína y los demás alcaloides en forma de sulfatos contenidos en la pasta de coca, tengan solubilidad en agua.

Consecutivamente, a la solución ácida se le adiciona una solución diluida de oxidante como lo es el permanganato de potasio, este oxida la cinamoilcocaína y otros alcaloides no deseados y como consecuencia, se genera un cambio de color, desde un café oscuro a café más claro, así mismo se presenta un cambio de una textura semisólida a una más consistente y por último resalta la reducción en los olores de los solventes, aspectos por los cuales el producto es apetecido por distribuidores y consumidores. Este nuevo producto, insoluble en agua es separado por filtración. Es de resaltar que el permanganato de potasio (KMnO_4) es indicador de oxidación debido a que presenta un cambio de coloración, desde su característico color violeta azulado hasta que se obtiene la solución incolora; su uso es sumamente esencial para la producción de cocaína.

La filtración anteriormente mencionada es realizada con una solución sulfúrica; a dicha solución se le alcaliniza con agua amoniacal u otras sustancias alcalinas como carbonato de calcio, hidróxido de sodio, acetatos o carbonato de sodio. Toda esta reacción convierte

el sulfato de cocaína obtenido en primer paso, en base de cocaína. La resultante de este proceso se separa nuevamente por filtración y la cocaína base se seca.

➤ **TERCER PASO: Obtención del Clorhidrato de Cocaína**

Para concluir con el proceso para la obtención del producto final, se toma la base de cocaína seca y se disuelve en una cantidad mínima de un solvente orgánico, que generalmente lo son la acetona y éter, con menor incidencia se adicionan en esta fase la metil etil cetona, metil isobutil cetona y alcoholes; para el caso de Colombia, los acetatos son los solventes mayormente utilizados en esta fase. Retomando el proceso, se filtra la solución con la finalidad de separar cualquier impureza bajo el principio de insolubilidad.

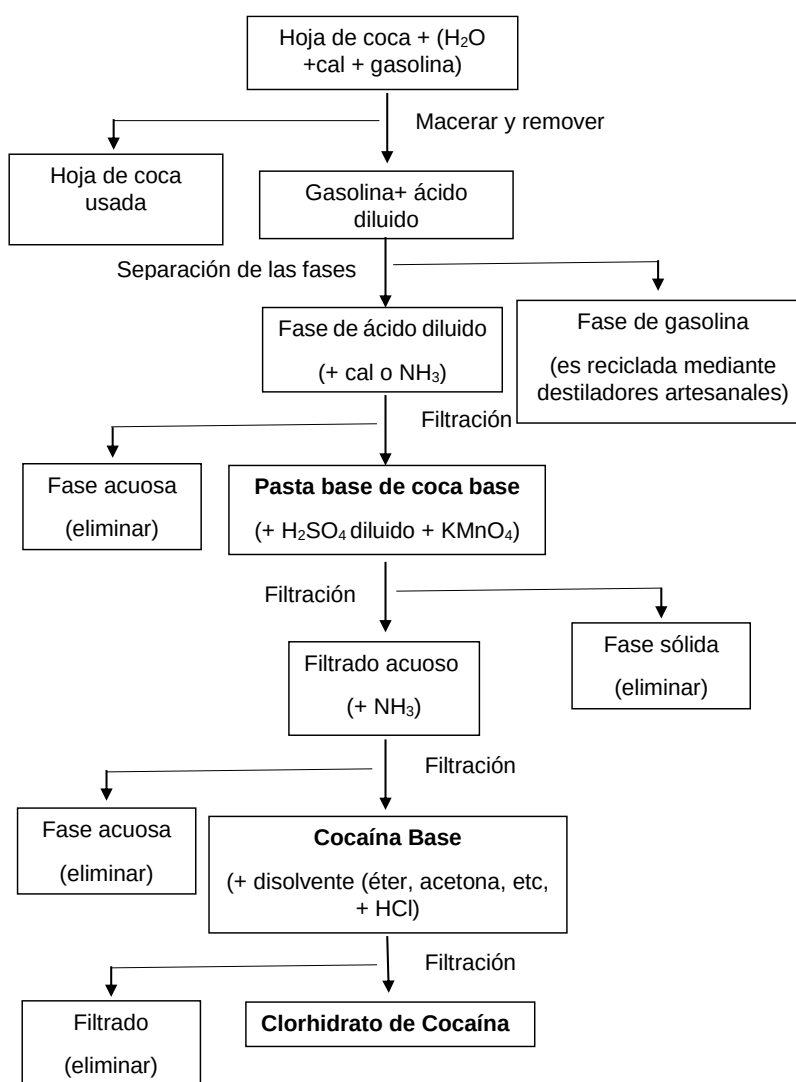


Figura 4. Diagrama de flujo de la obtención de clorhidrato de cocaína a partir de las hojas de coca (UNODC, 2012).

Al líquido obtenido se le es añadido una solución de ácido clorhídrico diluido en éter o acetona, siendo esta solución la que aporta los iones de cloro para la transformación final al clorhidrato de cocaína, la cual precipita por insolubilidad con los solventes mencionados. La solución final es filtrada y el clorhidrato de cocaína en su forma cristalina es retenida y secada. La pureza del producto final oscila entre el 90 % y el 98% dependiendo la calidad y las sustancias químicas empleadas durante el proceso (Departamento de Sustancias Químicas Controladas, 2015; Dirección Química Legal y División Cromatografía gaseosa, 2015; Proyecto PRADICAN, 2013; UNODC, 2012).

Partiendo del hecho de que anualmente se incautan cantidades considerables de sustancias controladas en el territorio nacional, surge la necesidad de tener metodologías analíticas disponibles, para identificar estas sustancias y poder ejercer las acciones de ley correspondientes como la espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier con accesorio de reflectancia total atenuada, que puede ser usado en la identificación de sustancias controladas; por lo tanto, se requieren bases de datos espectrales, específicas de las sustancias controladas en el país, teniendo en cuenta que en el momento no existe una base de datos con esta metodología para dichas sustancias en la Fiscalía General de la Nación.

1.2. ESPECTROMETRÍA INFRARROJA CON TRANSFORMADA DE FOURIER, CON ACCESORIO DE REFLECTANCIA TOTAL ATENUADA (ATR-FTIR)

La técnica analítica de espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) se emplea tanto en la industria como en ámbitos académicos con el propósito de examinar los grupos funcionales presentes en una muestra (Mettler-Toledo International Inc all rights, 2023). En esencia, el espectro infrarrojo (IR) derivado del espectrómetro FTIR se localiza en la región media del infrarrojo, específicamente entre 4000 y 400 cm^{-1} , abarcando un rango de 2.5 μm a 15 μm . Por lo tanto, la presencia de una banda de absorción en esta región puede ser utilizada para identificar la existencia de grupos funcionales específicos dentro de la molécula (Mohamed et al., 2017).

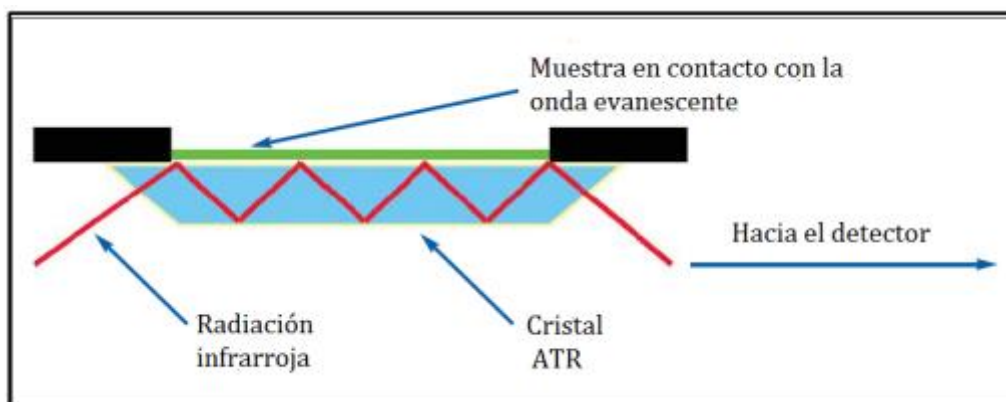


Figura 5. Ilustración del funcionamiento de un sistema de Reflectancia Total Atenuada (ATR) (Mohamed et al., 2017).

En la espectroscopia ATR-FTIR, se emplea el accesorio ATR para registrar las alteraciones en un haz de infrarrojos reflejado internamente al entrar en contacto con una muestra. En principio, un haz de infrarrojos se dirige hacia un cristal ópticamente denso con un alto índice de refracción, como diamante, seleniuro de zinc (ZnSe) y germanio, en un ángulo específico (Peter R. Griffiths & James A. de Haseth, 2007), como se ilustra en la Figura 5. Al entrar en contacto con el cristal ATR, el haz de infrarrojos genera múltiples reflectancias internas, creando así una onda evanescente que se extiende más allá de la superficie del cristal. La muestra, al interactuar con la onda evanescente, absorbe su energía, lo que resulta en la atenuación de la onda (Smith, 2011). El haz atenuado se refleja de nuevo en el cristal y sale por el extremo opuesto, dirigiéndose al detector en el espectrómetro de infrarrojos. El detector registra el haz de infrarrojos atenuado como una señal de interferograma, que posteriormente se puede utilizar para generar un espectro infrarrojo (Blum & John, 2012).

La utilización de técnicas forenses no destructivas desempeña un papel crucial en la identificación de drogas ilícitas y sustancias químicas, considerando la abundancia de muestras confiscadas. La espectroscopia ATR-FTIR, en particular, ha surgido como una valiosa alternativa para abordar este desafío, ya que posibilita un análisis eficiente y económico, además de facilitar la posibilidad de realizar análisis posteriores a las muestras (John et al., 2023).

Múltiples investigaciones donde se ha usado la espectroscopía infrarroja en el campo de las ciencias forenses, específicamente aplicada al análisis de estupefacientes, ha evidenciado la amplia capacidad para que a partir de su información espectral se puedan

identificar grupos funcionales y enlaces característicos en las estructuras químicas de drogas ilícitas; como lo evidencia la investigación realizada por Mengyu y colaboradores, donde analizaron con espectroscopía IR alrededor de 632 sustancias orgánicas con ciertas similitudes químicas con el fentanilo. Esto combinado con un modelo de machine learning (ML) logró un 92.5 % de precisión para identificar y diferenciar los grupos funcionales de interés en muestras derivadas de fentanilo (Xu et al., 2020). También se ha implementado el ATR-FTIR como método no destructivo para la clasificación de Cocaína, MDMA, heroína y cannabis (Deconinck et al., 2022)

Du y colaboradores en una investigación exhaustiva, donde el actor principal de análisis fue ATR-FTIR, combinado con seis algoritmos de machine learning, analizaron alrededor de 1062 espectros de nuevas sustancias psicoactivas (NPS) y lograron clasificarlas en ocho categorías de NPSs (triptaminas, benzodiazepinas, catinonas sintéticas, fenetilaminas, análogos de fentanilo, cannabinoides sintéticos y “otras sustancias”) (Du et al., 2023).

1.3. ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO

El concepto de "Quimiometría" se centra en la aplicación de herramientas matemáticas en el ámbito de la química. Según Wold, el objetivo principal de la quimiometría es traducir los problemas químicos a términos matemáticos. En lugar de ser una disciplina separada, la quimiometría debería integrarse como parte fundamental en todas las áreas de la química (González & Sánchez-Aguirre, 2020). La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) ha definido el concepto de Quimiometría como la disciplina que se encarga de establecer la relación entre las mediciones obtenidas en un sistema o proceso químico y el estado en que se encuentra dicho sistema, utilizando métodos matemáticos o estadísticos (Class et al., 2021).

Frecuentemente, las investigaciones forenses se basan en la evidencia tangible para reconstruir los sucesos relacionados con un delito. No obstante, se reconoce la necesidad de adoptar enfoques más imparciales en la interpretación de pruebas, junto con protocolos validados para la manipulación, preservación y análisis de la evidencia. La quimiometría se ha destacado como una herramienta poderosa en el ámbito de la ciencia forense para interpretar y mejorar los procedimientos analíticos (Sauzier et al., 2021).

1.3.1. ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (PCA)

El Análisis de Componentes Principales (PCA) disminuye la complejidad de los datos identificando las fuentes de variación ortogonales, denominadas "componentes principales" o PCs. Estos PCs son combinaciones lineales de las variables originales, cada una multiplicada por un factor de carga. Cada PC subsiguiente se calcula para explicar la máxima proporción de variación restante en los datos (Sauzier et al., 2021).

En resumen, PCA es una transformación básica que facilita el cambio desde una representación con la base canónica de las variables originales hacia una representación basada en los eigen vectores de la matriz de correlación (Bouricha et al., 2021).

La utilización de PCA con objetivos de análisis forenses se refleja en investigaciones ligadas con la adulteración de licores (Kamiloglu, 2019), de las cuales se ha podido determinar las diferencias basadas en sus diferencias estructurales, gracias a las combinaciones de análisis vibracionales y quimiométricos, estas determinaciones han incluido identificación relacionada con la calidad, la marca y origen de licores (Yi et al., 2024).

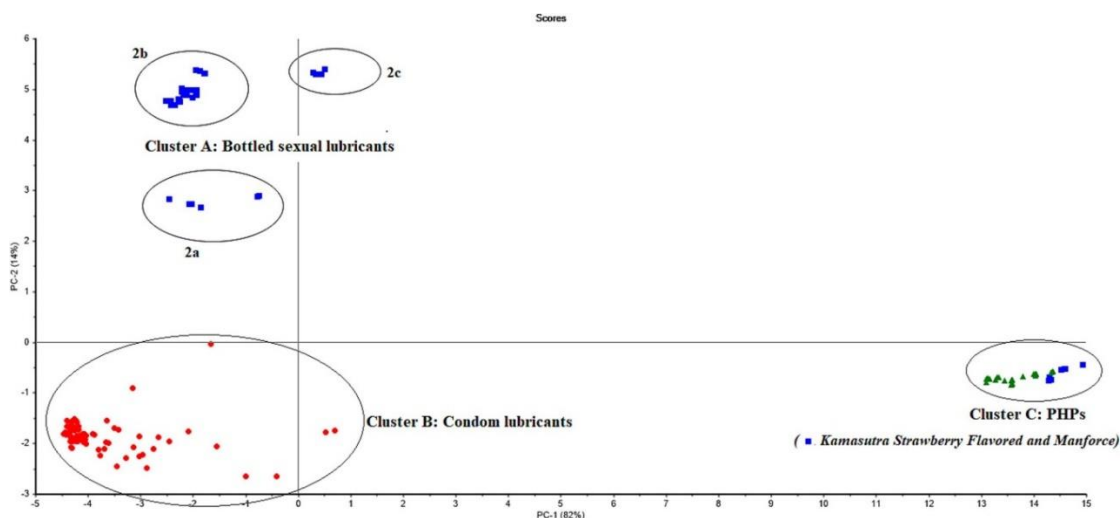


Figura 6. Gráfica de puntuaciones de PCA aplicado en la identificación de trazas de lubricantes sexuales (Nimi et al., 2023).

Otros usos dentro de las ciencias forenses está asociado con la determinación y presencia de drogas en matrices complejas de estudio, como en la investigación realizada por Pérez-Alfonso y colaboradores, en la determinación cuantitativa de cocaína en materiales

impregnados por espectrometría vibracional, donde el análisis de PCA demostró ser útil para determinar la capacidad del modelo en la determinación de cocaína en nuevas muestras (Pérez-Alfonso et al., 2018) . En 2023 se realizó una investigación aplicada a la diferenciación de lubricantes sexuales, los cuales generalmente se encuentran en las escenas del crimen (abuso sexual), y que la identificación de estos facilita la correlación de trazas de DNA en las muestras, la aplicación de PCA en espectros ATR-FTIR de estos productos permitió discriminar en base a su información espectral (Nimi et al., 2023), tal como se observa en la Figura 6.

Aparte del PCA existe otro método estadístico utilizado para categorizar a los individuos en distintas clases o grupos fue empleada por otros investigadores bajo el nombre de clasificación jerárquica ascendente (HCA) (Kassambara, 2017).

1.3.2. ANÁLISIS JERÁRGICO DE CONGLOMERADOS (HCA)

El análisis de clúster se refiere a un conjunto de algoritmos que agrupan objetos (ejemplos) según su similitud relativa. La selección del algoritmo y sus parámetros depende de las características del conjunto de datos y del objetivo del análisis (LA ROCA CERVIGÓN et al., 1999).

Es una técnica común en la que los objetos se agrupan para formar clústeres basados en su distancia de separación. Este proceso generalmente es aglomerativo, comenzando con objetos individuales y combinándolos progresivamente en clústeres más grandes. En este enfoque "ascendente", cada objeto se considera inicialmente como un clúster de tamaño uno, y se calculan las distancias entre cada par posible para compararlas. Los pares más cercanos se fusionan para formar un nuevo clúster y el proceso se repite hasta que solo queda un único clúster (Lavine, 2000).

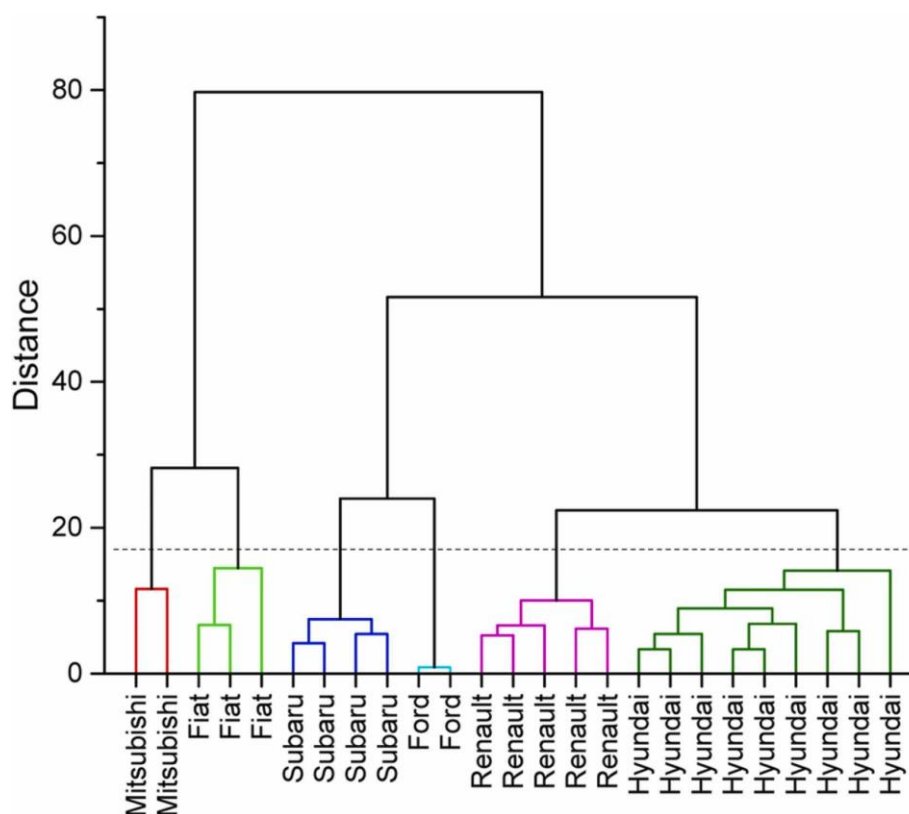


Figura 7. Dendrograma de elementos traza en muestras de parabrisas de automóviles (Sharma et al., 2022).

Usualmente, la estructura jerárquica de los clústeres se representa mediante un dendrograma (Figura 7), en el cual los objetos se visualizan según su agrupación en clústeres específicos (Miller & Miller, 2010). En análisis de inteligencia forense ha sido ampliamente utilizado, como en el estudio de perfilamiento químico de múltiples muestras de heroína en Afganistán, para la determinación de las diferentes rutas y orígenes de las mismas, lo cual reduciría las labores de inteligencia significativamente. El análisis se realizó a 155 muestras, de las cuales en el análisis jerárquico de conglomerados, mostró diez subgrupos distintos de heroína, lo cual concuerda con análisis preliminares de diez muestras que presentaron diferencias estructurales significativas; esta comparación de datos proporcionó información forense valiosa para evidenciar la presencia de diversos grupos involucrados en redes de tráfico en dicha región (Yusoff et al., 2018).

1.4. BASE DE DATOS ESPECTRALES

Una base de datos de espectros infrarrojos o IR, contiene información sobre cómo las sustancias inorgánicas y orgánicas reaccionan ante la luz infrarroja. Las moléculas absorben la luz infrarroja en distintos niveles según su estructura general. Utilizando la espectroscopia, los investigadores registran estos resultados y los incorporan a la base de datos del espectrómetro IR. Con frecuencia, los químicos, especialistas forenses e investigadores prueban sustancias desconocidas y comparan los resultados con la base de datos, lo que conduce a una identificación positiva. En el proceso de buscar en bases de datos espectrales, se compara una muestra cuya composición o fuente es desconocida con cada espectro presente en la biblioteca, utilizando una métrica adecuada para evaluar la similitud del espectro de la muestra con un espectro de la base de datos espectrales (Lavine et al., 2020)

Los científicos forenses emplean la espectroscopia infrarroja junto a metodologías comúnmente usadas en el laboratorio como cromatografía de gases acoplado a detector selectivo de masas (GC/MS), resonancia magnética nuclear de protón (RMN-¹H), cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), espectroscopía Raman etc. Estos métodos instrumentales usando bases de datos correspondientes, permiten identificar de manera precisa, drogas ilícitas, elucidación de nuevas sustancias psicoactivas (NPS), identificación de adulterantes y diluyentes usados en la fabricación de drogas, fibras y muestras de pintura en los lugares donde ocurrió un asesinato, etc (Hachem et al., 2023; Kimani et al., 2022; Marcelo et al., 2015; Nguyen et al., 2023; Spiegato, 2021).

En el año 2020 se registró que en los últimos 20 años hasta el 2018, circulan alrededor de 700 NPSs en el mercado europeo, las cuales son fabricadas para evadir la fiscalización correspondiente debido a que no se han incluido a los listados de estupefaciente sometidos a estos procesos por parte de las autoridades. Es por ello que en la investigación realizada por Piorunska y Estipulkowska analizaron 45 sustancias originarias del mercado polaco donde utilizando bases de datos espectrales comerciales (que poseen los equipos analíticos) e internas, pudieron identificar 23 sustancias; las 22 restantes se analizaron mediante LC–MS/MS y GC–MS para elucidar las moléculas. Luego se realizó análisis ATR-IR de dichas NPSs para nutrir la base de datos espectrales internas del equipo con el fin de usarlas en futuros análisis a incautaciones dispuestas al laboratorio (Piorunska-Sedlak & Stypulkowska, 2020).

Durante la búsqueda en bases de datos espectrales, se contrasta una muestra cuya composición o fuente son desconocidas con cada espectro, utilizando una medida apropiada para valorar la semejanza. Esta muestra podría consistir en un fragmento de pintura y el propósito de la búsqueda es determinar la composición del fragmento mediante el uso de una biblioteca de componentes estándar; se eligen los espectros de referencia en la base de datos que se consideran similares debido a la presencia de una familia de bandas en una región específica de longitud de onda, tanto en el espectro desconocido como en el de referencia, utilizando un algoritmo de búsqueda. Estos resultados se presentan al usuario como una lista de las mejores coincidencias con el espectro de referencia (Lavine et al., 2020).

Las medidas de similitud empleadas en los algoritmos de búsqueda de bases de datos comerciales para los espectros originales o sus derivadas primarias abarcan el coeficiente de correlación obtenido de absorbancias centradas en la media, el coeficiente de correlación calculado directamente a partir de los valores de absorbancia, las diferencias absolutas de absorbancia y la distancia euclidiana (Varmuza et al., 1998).

1.5. ANÁLISIS R&R (REPRODUCIBILIDAD Y REPETIBILIDAD)

El análisis R&R permite evaluar al mismo tiempo la repetibilidad y la reproducibilidad, siendo este un estudio realizado de manera experimental. A través del diseño de experimentos y el análisis de varianza, se lleva a cabo la evaluación de la repetibilidad y reproducibilidad del sistema de medición. Se emplea un diseño factorial que posibilita determinar si el sistema de medición es repetible (si hay precisión consistente en las mediciones cuando un operador mide varias veces la misma pieza con el mismo instrumento) y reproducible (si hay precisión consistente en las mediciones cuando varios operadores miden varias veces la misma muestra con el mismo instrumento) (Vinazco Luz, 2012). La repetición y la reproducibilidad son esenciales para confirmar la fiabilidad de los experimentos científicos (Peta et al., 2024), es por ello que usualmente se utilizan en análisis químicos de tipo cualitativo, ya que la base estadística aporta mayor veracidad en los datos que se obtienen de la metodología analítica.

El análisis de repetibilidad y reproducibilidad (R&R) permite cuantificar la variabilidad dentro de cualquier tipo de proceso y evaluar si esta variación es aceptable. Existen varios métodos para llevar a cabo el análisis R&R, pero el método ANOVA es considerado el más preciso para calcular la variabilidad dentro de un proceso (Llamosa et al., 2007). El Método

de Análisis de Varianza (ANOVA) es considerado el enfoque más preciso para evaluar la variabilidad en un sistema de medición, ya que permite cuantificar la variación resultante de la interacción entre los operadores y las partes. Este método se basa en la misma técnica estadística utilizada para analizar los efectos de diferentes factores en el diseño experimental. En el contexto de un sistema de medición, ANOVA se emplea para examinar simultáneamente los efectos de dos fuentes de variación: los operadores y las partes (Vargas et al., 2007).

Después de analizar la repetibilidad y reproducibilidad, se investigan las causas de la variación del sistema o instrumento.

- Si la repetibilidad supera a la reproducibilidad, las causas pueden ser: necesidad de mantenimiento, rediseño del equipo para mayor rigidez, mejora en el montaje o ubicación de las mediciones y/o excesiva variabilidad entre las partes.
- Si la reproducibilidad es mayor que la repetibilidad, las causas pueden incluir: falta de entrenamiento para el operador, indicación poco clara del instrumento, falta de mantenimiento de condiciones de reproducibilidad y/o deriva en el instrumento de medición (Contreras & Arbelaez, 2007).

1.5.1. PRECISIÓN

Es una medida de la capacidad de reproducir un resultado. Si se mide una cantidad varias veces de la misma forma y los valores obtenidos son muy similares entre sí, se considera que la medición es precisa (Dolores et al., 2012).

La precisión de las mediciones depende del analista, del instrumento de medición utilizado y del objeto o variable observada en el estudio. Para minimizar los errores aleatorios y reducir los posibles sesgos de medición, el investigador debe considerar la variabilidad de todos estos componentes al planificar las mediciones de las variables del estudio. Además, es fundamental conocer la confiabilidad del analista, tanto en el caso de un solo observador (intra-analista) como cuando hay múltiples observadores (inter-analistas), lo cual subraya la importancia de una formación y entrenamiento adecuados para los analistas (Manterola et al., 2018).

2. OBJETIVOS

2.1. OBJETIVO GENERAL

Elaborar una base de datos espectrales de referencia con sustancias controladas, para el laboratorio de química de la Fiscalía General de la Nación- seccional Norte de Santander.

2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Determinar el perfil químico de las sustancias controladas en Colombia, conforme a lo establecido en la resolución 0001 del 8 de enero del 2015 del Consejo Nacional de Estupefacientes, mediante ATR-FTIR.
- Aplicar análisis quimiométrico para la discriminación de tipos de Cemento, Thinner y Gasolina.
- Realizar un análisis R&R (Repetibilidad y Reproducibilidad) para evaluar la variabilidad en las mediciones del ATR-FTIR en muestras de sustancias controladas.

3. METODOLOGÍA

3.1. MUESTREO

Las muestras de sustancias químicas controladas fueron suministradas por el laboratorio de química de la Fiscalía General de la Nación, dichas muestras fueron enviadas al CTI de la Fiscalía de Pamplona, las cuales finalmente fueron entregadas en el laboratorio de Biocalorimetría de la Universidad de Pamplona. El análisis de sustancias se realizó de acuerdo a la disponibilidad de sustancias en la Fiscalía General de la Nación (ver Tabla 3).

Las muestras comerciales de cemento, thinner, gasolina y A.C.P.M, fueron obtenidas en las ciudades de Pamplona y Bucaramanga, en distintos puntos de venta de estos productos.

3.2. REACTIVOS

Además de las sustancias de la Tabla 3, sustancias como Anhídrido acético, Diacetona alcohol, Dióxido de manganeso, Disolvente No. 1, Disolvente No. 2, Éter etílico y Manganato de potasio no fueron proporcionadas por la Fiscalía General de la Nación por cuestiones de disponibilidad en el laboratorio de química de la institución.

Tabla 3. Reactivos dispuestos por la Fiscalía General de la Nación. (Fuente: Autor)

No	Sustancia Controlada	Lote	Marca
1	Acetato de butilo	k41308652147	Merck
2	Acetato de etilo	433850	Panreac
3	Acetato de isobutilo	s6508557335	Merck
4	Acetato de isopropilo	s6508557335	Merck
5	Acetato de n-propilo	SN	SN
6	Acetona	V08C55	JT Baker
7	Ácido clorhídrico	22279409	Loba Chemie PVT LTD
8	Ácido sulfúrico	22313003	Loba Chemie PVT LTD
9	Alcohol isopropílico	SN	SN
10	Amoniaco (Hidróxido de Amonio)	C19B37	Mallinckrodt CHEMICALS
11	Butanol	I545289034	Merck
12	Carbonato de sodio	SN	SN

13	Cloroformo	CL02031000	Scharlau
14	Cloruro de calcio	k90244389	Merck
15	Disolvente No. 1A	NA	Ecopetrol
16	Hexano	L310782204	Loba Chemie PVT LTD
17	Metanol	136153	Loba Chemie PVT LTD
18	Metabisulfito de sodio	136153	Merck
19	Metil etil cetona	6240A07755	Mallinck RODT
20	Metil isobutil cetona	k38608246814	Merck
21	Permanganato de potasio	k41205882035	Merck
22	Tolueno	9460-02	JT Baker
23	Bisulfito de sodio	130378	Fisher Scientific

3.3. EQUIPOS, INSTRUMENTOS Y MÉTODOS

La base de datos espectrales se realizó con el equipo de Espectroscopía Infrarroja con Transformada de Fourier, con Accesorio de Reflectancia Total Atenuada ATR-FTIR (Shimadzu IRPrestige-21 con accesorio ATR MIRacle con cristal de Diamante), pipetas pasteur, vasos de precipitado de 50 mL y de 100 mL, embudo de gravedad, papel filtro, mortero de ágata con pistilo, viales de vidrio, retenedor de líquidos con accesorio para volátiles (Shimadzu).

3.4. CALIBRACIÓN DEL EQUIPO CON PELÍCULA DE POLIESTIRENO

Para iniciar con los análisis de sustancias se procedió a realizar una calibración rutinaria con película de poliestireno, el cual se emplea como patrón para calibrar la escala de números de onda en espectrómetros de infrarrojos con transformada de Fourier (FT-IR) y también se utiliza para garantizar el control de calidad en las mediciones realizadas por FT-IR (Herrera-Basurto et al., 2006). El espectro de poliestireno se tomó a 24 scans, 4 cm^{-1} de resolución y en el rango comprendido entre 4000 cm^{-1} y 500 cm^{-1} . Obtenido el espectro se verificó la presencia de 9 bandas indicativas de los grupos funcionales presentes en el poliestireno.

3.5. ANÁLISIS DE SUSTANCIAS QUÍMICAS CONTROLADAS PARA DETERMINACIÓN DEL PERFIL QUÍMICO Y GENERACIÓN DE LA BASE DE DATOS ESPECTRALES

Con las sustancias químicas controladas dispuestas en el laboratorio de Biocalorimetría de la Universidad de Pamplona, contenidas en viales de vidrio en muestras líquidas y bolsa ziploc para las muestras en estado sólido, todos rotulados de acuerdo al orden de sustancias en la resolución 0001 del 2015 (Consejo Nacional de Estupefacientes, 2015), tal como se observa en la Figura 8, se asignó un vial para cada analista y se procedió a realizar el análisis mediante ATR-FTIR a cada sustancia con el equipo descrito en la sección 3.3, donde para cada sustancia se realizaron 3 repeticiones por cada uno de los dos analistas asignados a la investigación, asumiendo para el análisis los parámetros de medición descritos en la Tabla 4.



Figura 8. Sustancia química controlada enviada por la Fiscalía General de la Nación.
(Fuente: Autor)

Antes de analizar las sustancias se realizó Background con el equipo para de esta forma obtener un espectro del aire o área de trabajo, con el fin de que el equipo eliminase dicha información, en caso de hacer interferencia con las muestras. En las sustancias en estado líquido se utilizó una pipeta pasteur para tomar la muestra y aplicarla sobre el retenedor de líquidos, facilitado por el laboratorio de química de la Fiscalía General de la Nación

Seccional Norte de Santander, como se observa en la Figura 9, donde se aprecia el montaje del retenedor de líquidos con muestra líquida aplicada y la cubierta para volátiles, teniendo el cuidado de no generar ninguna burbuja que pudiese quedar contenida en la muestra ya que esta podía alterar el espectro, esto por la interacción de la energía IR con la burbuja de aire (Obando Papamija, 2017).



Figura 9. Montaje para el análisis ATR-FTIR de sustancias líquidas. (Fuente: Autor)

En cuanto al análisis de las sustancias sólidas, como el cloruro de calcio, permanganato de potasio, sulfato de amonio y cloruro de amonio se tuvo en cuenta la influencia del tamaño de partícula (Jimare Benito et al., 2008), por ello cada una de las muestras sólidas excepto los cementos que en su forma física se presenta en polvos finos, se maceraron en el

mortero de ágata para posteriormente analizarlos mediante ATR-FTIR, ajustando la muestra macerada con la prensa del equipo como se aprecia en la Figura 10.

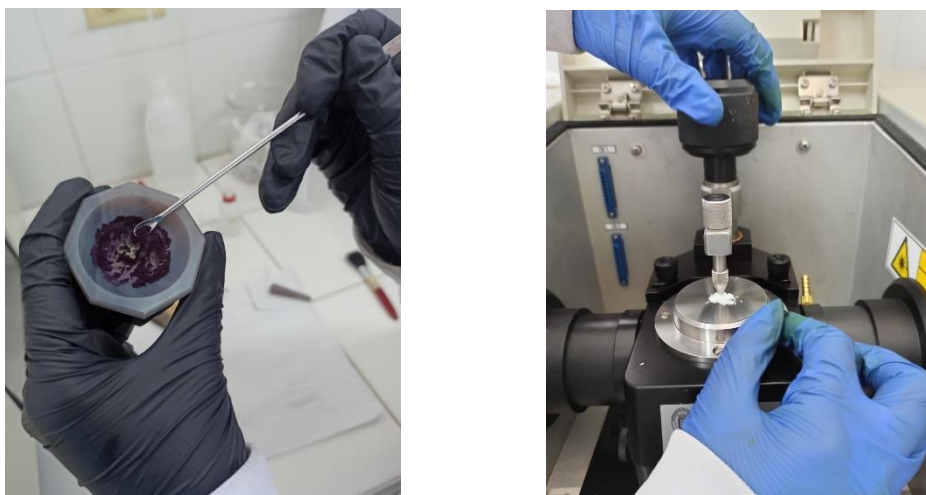


Figura 10. Preparación y análisis ATR-FTIR de sustancias sólidas, permanganato de potasio (izquierda), cloruro de calcio (derecha). (Fuente: Autor)

Los espectros obtenidos, se trataron en el software IRSolution 2002, el cual toma los datos espectrales directamente del equipo, allí se realizó el tratamiento de los datos espectrales, tales como: corrección de línea base, normalización de [0,1], primera y segunda derivada para cada sustancia analizada.

Las gráficas espectrales se generaron y editaron en OriginPro9 versión demo, para la identificación de grupos funcionales característicos de cada SQC y posteriormente determinar el perfil químico de las muestras. La información espectral de todas las SQC analizadas se agregaron a una base de datos espectrales de referencia al software IRSolution 2002, usado en el equipo infrarrojo del laboratorio de química de la Fiscalía General de la Nación seccional Norte de Santander-Cúcuta.

Tabla 4. Parámetros de medición mediante ATR-FTIR de sustancias químicas controladas. (Fuente: Autor)

EQUIPO	IRPrestige-21
Accesorio	ATR
Medida	Absorbancia
Apodización	Happ-Genzel
Número de Scan	24
Resolución (cm^{-1})	4
Rango	4000– 550 cm^{-1}

3.5.1. PREPARACIÓN DE SALES DE AMONIO PARA EL ANÁLISIS DE MUESTRAS CORROSIVAS

Teniendo en cuenta que las sustancias corrosivas como el Ácido clorhídrico y Ácido sulfúrico, pueden averiar el accesorio ATR del equipo infrarrojo, se procedió a preparar estas sustancias en forma de sales, tal como lo describe el PROTOCOLO ANÁLISIS DE ESTUPEFACIENTES Y SUSTANCIAS CONTROLADAS en su anexo 3, llamado ácidos inorgánicos, contenido en el anexo 1, el cual es usado en el laboratorio de la Fiscalía General de la Nación.

Teniendo en cuenta que la sal de sulfato de amonio, producto de la derivatización del ácido sulfúrico, fue proporcionada por la Fiscalía General de la Nación, se procedió a sintetizar el cloruro de amonio, a partir del ácido clorhídrico (HCl) al 37 % v/v de concentración, en el laboratorio de control de calidad de la Universidad de Pamplona, donde se tomaron 0,5 mL de hidróxido de amonio al 30 % v/v y se adicionaron a un vaso de precipitado de 100 mL, seguidamente se adicionaron 2 gotas de ácido clorhídrico y se mezcló cuidadosamente; el pH de la solución se verificó y presentó un pH aproximado de 8. Para la precipitación de la sal se adicionaron 40 mL de acetona, teniendo en cuenta que la sal de amonio es insoluble en este solvente orgánico, de allí se dejó por 15 minutos aproximadamente hasta que se observó la formación de la sal como se aprecia en la Figura 11, finalmente se pasó por el papel filtro, se dejó secar a temperatura ambiente y se analizó mediante ATR-FTIR.



Figura 11. Preparación de cloruro de amonio. (Fuente: Autor)

Con la obtención del cloruro de amonio y el sulfato de amonio dispuesto en el laboratorio, se procedió al análisis mediante ATR-FTIR, esto luego de macerar las sales para mantener un tamaño de partícula óptimo para su análisis.

3.6. ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO EN MUESTRAS DE CEMENTO, THINNER Y GASOLINA

Dentro de las sustancias controladas en Colombia se encuentran el cemento, el thinner y la gasolina, que son de origen comercial y tienen una serie de compuestos dentro de su formulación química. Se consideró que de cada uno de ellos existen dos tipos (gasolina corriente y gasolina extra), que son únicamente generados por Ecopetrol. Del thinner se analizaron marcas de Bucaramanga (Quisansol) y Cúcuta (America Logistic). En el caso particular del cemento, se tuvo en cuenta que existen tres tipos (blanco, corriente y estructural) y también se comercializan distintas marcas del mismo. Partiendo de lo anterior, se analizaron cuatro marcas distintas (Argos, Holcim, CEMEX Y Tequendama) de los tres tipos de cemento con el fin de determinar si existen diferencias significativas al analizar mediante ATR-FTIR; adicionalmente se aplicó análisis quimiométrico para determinar puntualmente las diferencias entre cada uno de los tipos de muestra de cada una de las sustancias (García Carretero, 2017) . Dicho análisis se realizó con el fin de proporcionar la mayor información posible acerca de las diferencias químicas estructurales entre estos tipos de productos, ya que, con esa información citada, se facilitará en futuras investigaciones la identificación del origen de estupefacientes correlacionando con el uso de distintos reactivos durante su síntesis.

Para ello se tomó la información espectral de cada una de las muestras (previamente analizada por quintuplicado) y se construyó una matriz de datos, utilizando su región de huella dactilar, comprendida desde 550 cm^{-1} – 1700 cm^{-1} (Mata-Miranda et al., 2017), utilizando los datos de primer orden, primera y segunda derivada para determinar con qué información se obtendría una mejor discriminación de las muestras. Por último, se realizaron análisis de componentes principales (PCA) y Análisis Jerárquico de Conglomerados (HCA) en el software Minitab18 versión demo, donde se discriminaron y diferenciaron las muestras de acuerdo con su información espectral.

3.7. ANÁLISIS DE REPETIBILIDAD Y REPRODUCIBILIDAD

En cuanto al análisis R&R se tomaron los espectros de las sustancias controladas gestionadas por la Fiscalía General de la Nación (Tabla 3), bajo los parámetros de medición descritos en la Tabla 4, donde se estableció el rango de $4000\text{--}550\text{ cm}^{-1}$ teniendo en cuenta que es el límite inferior de las mediciones usando el accesorio de ATR. Teniendo en cuenta que para el análisis debía existir cambio en algún factor como, variación de los parámetros de medición, laboratorio, metodología analítica entre otros factores, que permiten evaluar la variabilidad y precisión de las medidas cuando se realizan repetidas repeticiones y cambiando alguno de estos factores. En este trabajo de investigación se realizó cambio de analista, siendo el analista 1 el autor y el analista dos, Lisbeth Daniela Mora González (Estudiante de Química), como se aprecia en la Figura 12, a cada uno de los analistas se les asignó un vial para cada sustancia controlada en estado líquido, en el caso de las sólidas, cada uno tomó una porción de muestra y la maceró por separado en el mortero de ágata previo a su análisis.

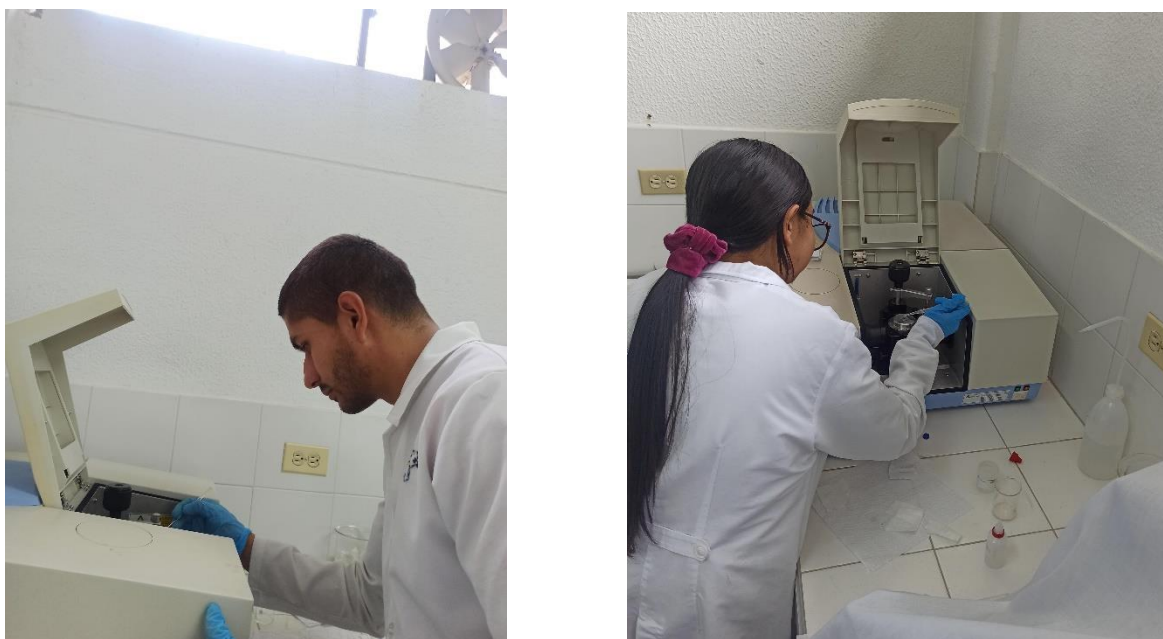


Figura 12. Analistas para el análisis R&R. (Fuente: Autor)

Basado en lo anterior, cada analista realizó mediciones de cada sustancia por triplicado, para determinar la variabilidad de los espectros al realizar repetidos análisis y cambiando de analista, bajo los mismos parámetros de análisis. Respecto a las mediciones, para empezar, se realizó el barrido de fondo (background) antes del análisis de cada sustancia

y en cada cambio de analista. Los espectros, tal como se describe en la sección 3.5, se trataron en el software del equipo infrarrojo IRSolution 2002, realizando la corrección de línea base, normalización, primera y segunda derivada, a partir de allí, los datos espectrales se llevaron a una matriz individual en Excel, con el número de onda y las absorbancias de las seis repeticiones totales tomadas por los dos analistas, lo anterior para cada una de las sustancias analizadas.

Tabla 5. Rangos para el cálculo del área bajo la curva de las SQC a partir de su información espectral. (Fuente: Autor)

No	Sustancia Controlada	Rango de integración de cada sustancia (cm ⁻¹)	Bandas de absorción integradas (cm ⁻¹)
1	Aceite Combustible Para Motor (A.C.P.M).	2787-3030	2920 - 2850
2	Acetato de butilo	1153-1338	1230
3	Acetato de etilo	1672-1803	1737
4	Acetato de isobutilo	1340-1500	1469 – 1373
5	Acetato de isopropilo	1072-1130	1108
6	Acetato de n-propilo	2843-3001	2960 – 2875
7	Acetona	1660-1780	1715
8	Ácido clorhídrico	2700-3330	3118 – 3022 – 2803
9	Ácido sulfúrico	1271-1525	1400
10	Alcohol isopropílico	2750-3750	3337-2966-2933-2878
11	Butanol	2777-3603	3310-2954-2920-2871
12	Carbonato de sodio	738-1487	1455-1277-989-832
13	Cemento	1234-1571	1410
14	Cloroformo	684-800	745
15	Cloruro de calcio	576-740	660
16	Disolvente No. 1A	2802-3010	2954-2946-2871
17	Gasolina para Motor	2752-3090	2953-2923-2874
18	Hexano	2816-2997	2954-2920-2858
19	Metanol	3057-3618	3323
20	Metabisulfito de sodio	715-1236	1160-1068-969
21	Metil etil cetona	1132-1197	1174
22	Metil isobutil cetona	1571-1838	1720
23	Permanganato de potasio	551-948	887
24	Thinner	923-1192	1030-1119
25	Tolueno	653-753	722-694
26	Bisulfito de sodio	580-680	633

Seguidamente se utilizó el software Matlab versión online para la determinación del área bajo la curva de una o más bandas específicas de cada sustancia, tales como las características de las vibraciones de enlaces C-H, C-O, C-Cl, C-N, etc. Dichas bandas se

encuentran tipificadas de acuerdo al rango de integración de las bandas de cada espectro como se describe en la Tabla 5; para la obtención de la información mencionada, se utilizó el código que se observa en la Figura 11, donde se asigna el rango de cada sustancia en la señal 1 y se exportaron los valores en Excel.

```

1      clc, clear, close all;
2
3      filename = 'Acetato de butilo.xlsx';
4      T = xlsread('Acetato de butilo.xlsx');
5
6      %% Señales
7      senal{1} = (315:411)-1;
8
9
10     %% Calcular areas
11     for i=1:length(senal)
12         area_senal(i,:) = trapz(T(senal{i},1), T(senal{i},2:end));
13         varNames{i} = ['Area_Senal_' , num2str(i)];
14     end
15
16     %% Exportar tabla a excel
17     T2 = array2table(area_senal, 'VariableNames', varNames);
18     writetable(T2, ['Areas_', filename]);

```

Figura 13. Código Matlab para la obtención del área bajo la curva de las sustancias químicas controladas (Rivera B, Diego et al., 2024).

Estos datos obtenidos (seis valores de área de la misma banda), se llevaron a una matriz de datos donde se unificaron las cantidades de repeticiones por cada sustancia y por cada operador, para finalmente con la matriz realizar el análisis de reproducibilidad y repetibilidad en el software Minitab18 versión de prueba.

4. RESULTADOS Y ANÁLISIS

4.1. CALIBRACIÓN CON PELÍCULA DE POLIESTIRENO

Para dar inicio al análisis ATR-FTIR de las sustancias controladas, se tuvo en cuenta el análisis de la película de poliestireno, con la finalidad de calibrar el equipo infrarrojo para dar confiabilidad en las medidas en cuanto a la exactitud en la posición de la banda, tal como lo evaluaron Nicolau y Matzger en su estudio de la variabilidad de las medidas al cambiar de equipo IR en el análisis de acetaminofén, siendo este un producto farmacéutico con polimorfismo cristalino (Nicolau & Matzger, 2024) donde corroboraron los números de onda de las bandas asociadas a los grupos funcionales de la película de poliestireno. De acuerdo con lo anterior, se analizó la película de poliestireno y se generó el espectro ATR-FTIR del mismo (ver Figura 14), con la finalidad de identificar las bandas relacionadas con la muestra y confirmando los números de onda en las que cada banda de absorción mostró.

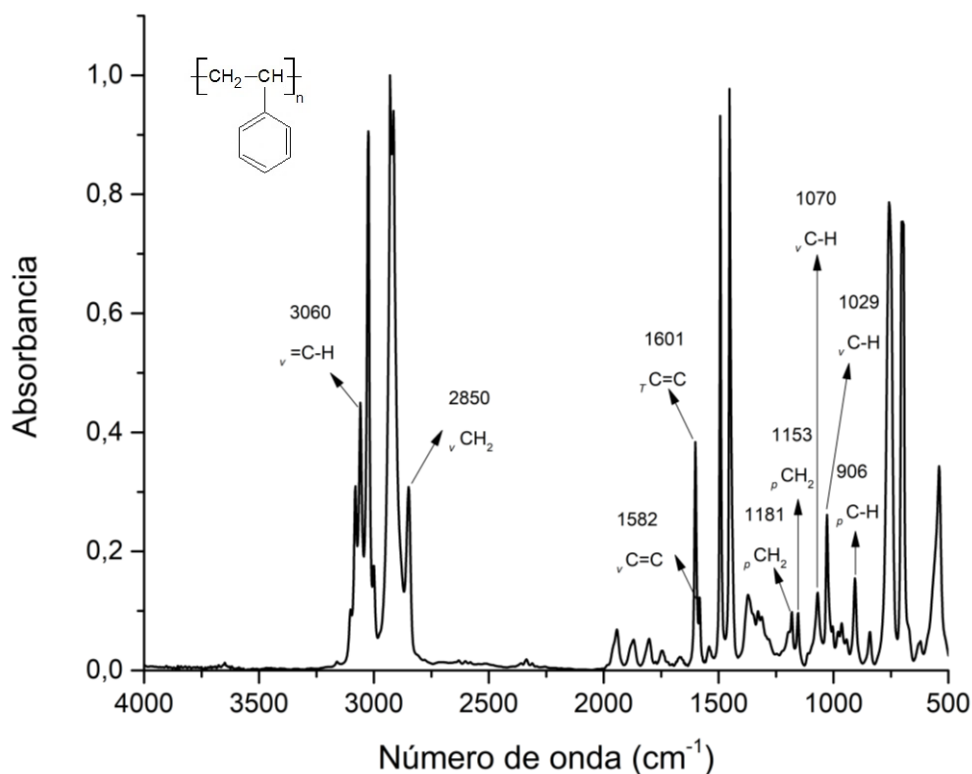


Figura 14. Espectro ATR-FTIR del poliestireno. (Fuente: Autor)

En relación con el espectro de la Figura 14, se dio evidencia de los números de onda específicos de la película de poliestireno que en este caso es de la marca Shimadzu

Corporation como se presenta en el anexo 2. Del espectro se identificaron 9 bandas concernientes con las principales vibraciones presentes en el poliestireno y a su vez se dio fiabilidad en las medidas a tomar en la investigación. En el espectro se identificaron las bandas principales del poliestireno, que representan las vibraciones principales de estiramiento simétrico, tensión, balanceo fuera y dentro del plano de los enlaces C-H del anillo aromático y grupo metileno presente en la estructura del polipropileno, tales asignaciones se encuentran en la Tabla 6. Así mismo se corroboraron las asignaciones con los trabajos de Cherkashina, donde se asignaron vibraciones del polipropileno en números de onda que concuerdan específicamente con los determinados en este trabajo (Cherkashina et al., 2024), de igual forma, en la literatura se encontraron bandas del poliestireno de las regiones de 1602 cm^{-1} 1580 cm^{-1} y 902 cm^{-1} que se atribuyen a la tensión y balanceo en el plano de enlaces C=C y C-H respectivamente (Rehman et al., 2022) (Yabagi et al., 2018).

Tabla 6. Asignaciones de las bandas del poliestireno. (Fuente: Autor)

Número de onda determinado (cm^{-1})	Número de onda del Film de Poliestireno (cm^{-1})	Asignación
3060	3061	Estiramiento =C-H
2850	2850,7	Estiramiento asimétrico CH_2
1601	1601,4	Tensión C=C
1582	1583,1	Estiramiento C=C
1181	1181,4	Balanceo dentro del plano CH_2
1153	1154,3	Balanceo fuera del plano CH_2
1070	1069,1	Balanceo fuera del plano C-H Ar
1029	1028	Balanceo fuera del plano C-H Ar
906	906,7	Balanceo en el plano C-H del benceno

Por otra parte, en un aporte de Guillaume en la preparación del equipo infrarrojo acoplado a gases para cuantificación, se encontró que en los números de onda usados para verificar las medidas del poliestireno concuerdan con los evaluados en esta fase del trabajo (Guillaume & Saragoza, 2015).

4.2. ANÁLISIS DE SUSTANCIAS QUÍMICAS CONTROLADAS PARA DETERMINACIÓN DEL PERFIL QUÍMICO Y GENERACIÓN DE LA BASE DE DATOS ESPECTRALES

Posteriormente a la calibración del equipo con la película de poliestireno, se realizó un background al analizar cada sustancia, al observar señales de ruido en los espectros durante el análisis ya que como afirma Zhang y colaboradores, al no realizar un espectro de fondo (background), cabe la posibilidad de una interferencia con el espectro de interés, esto por no eliminar la información del ambiente o zona de trabajo (Zhang et al., 2022). Teniendo en cuenta lo dicho, se procedió al análisis de sustancias enviadas desde la Fiscalía General de la Nación.

METANOL

Se procedió al análisis de la sustancia de metanol, la cual presentó el espectro en la figura 15. Esta representa las bandas características de dicha sustancia, como los estiramientos asimétricos y simétricos del grupo metilo en la región de 2940 y 2830 cm^{-1} , también se confirmaron las bandas de 1448 y 1119 cm^{-1} correspondientes al balanceo dentro y fuera del plano de dicho grupo, así como lo indica la Tabla 7.

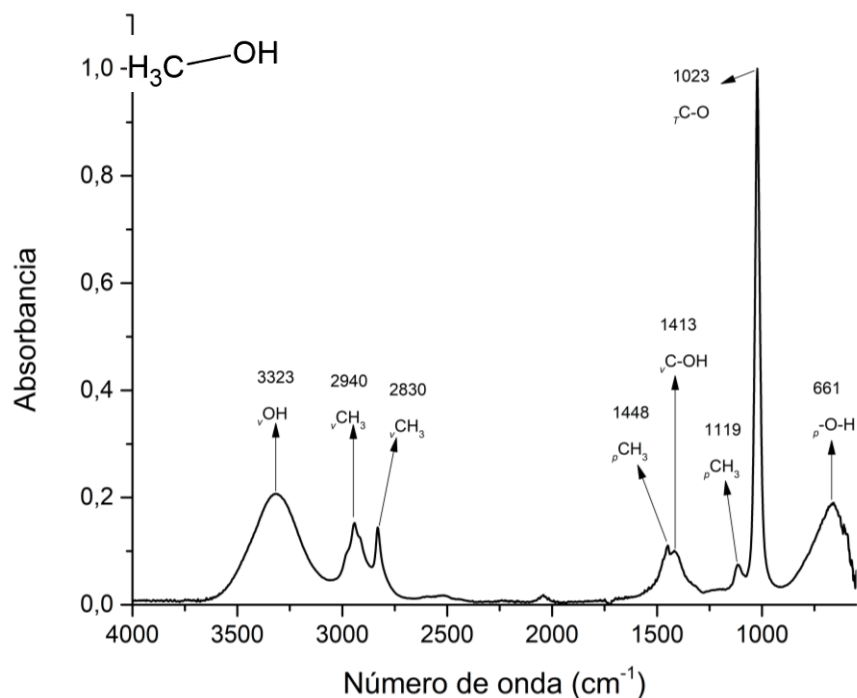


Figura 15. Espectro ATR-FTIR del metanol (Fuente: Autor)

La banda de amplia frecuencia en 3323 cm^{-1} que es indicativa del estiramiento presente en el enlace O-H del alcohol, enlace que es confirmado por la banda asignada a la flexión -O-H de la sustancia alrededor de los 661 cm^{-1} . Por otra parte, se identificaron las bandas asociadas a las vibraciones indicativas del enlace C-O y C-OH con una banda intensa y de mediana intensidad (Larkin, 2018).

Tabla 7. Asignaciones para el espectro ATR-FTIR del metanol. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
3323	Estiramiento OH
2940	Estiramiento simétrico CH_3
2830	Estiramiento asimétrico CH_3
1448	Balanceo dentro del plano CH_3
1413	Balanceo C-O-H
1119	Balanceo fuera del plano CH_3
1023	Tensión C-O
661	Flexión -O-H

ALCOHOL ISOPROPÍLICO

Teniendo en cuenta que el alcohol isopropílico comparte grupos funcionales con sustancias como el metanol y butanol, es evidente que existe una similitud en sus bandas características, tal como se evidencia con las Figuras 15, 16 y 17; teniendo en cuenta lo observado en el espectro del alcohol isopropílico presentó bandas indicativas de las vibraciones del grupo metilo, cerca de dicha región se presenta una banda de amplia frecuencia que es propia del grupo OH y esta banda es observada en los tres espectros. Partiendo del hecho de que el alcohol isopropílico presenta mayor cantidad de enlaces CH_3 a diferencia del metanol, se pudo visualizar una diferencia significativa en la intensidad de las bandas de dicha vibración, así como en la banda de 661 cm^{-1} relacionada con la flexión -O-H.

Según lo observado en la Figura 16, se pudo deducir que las bandas en 1160 y 825 cm^{-1} comprueban las vibraciones de la estructura formada por los enlaces C-C-O de la molécula, lo que hace que las bandas sean propias del alcohol isopropílico. En cuanto al desplazamiento de algunas bandas presentes en las tres moléculas, se pudo evidenciar que la banda asociada al enlace C-O alrededor de 950 cm^{-1} tuvo variación en las tres sustancias, debido a sus diferencias estructurales que se basan en la cadena carbonada y la ramificación de una ellas.

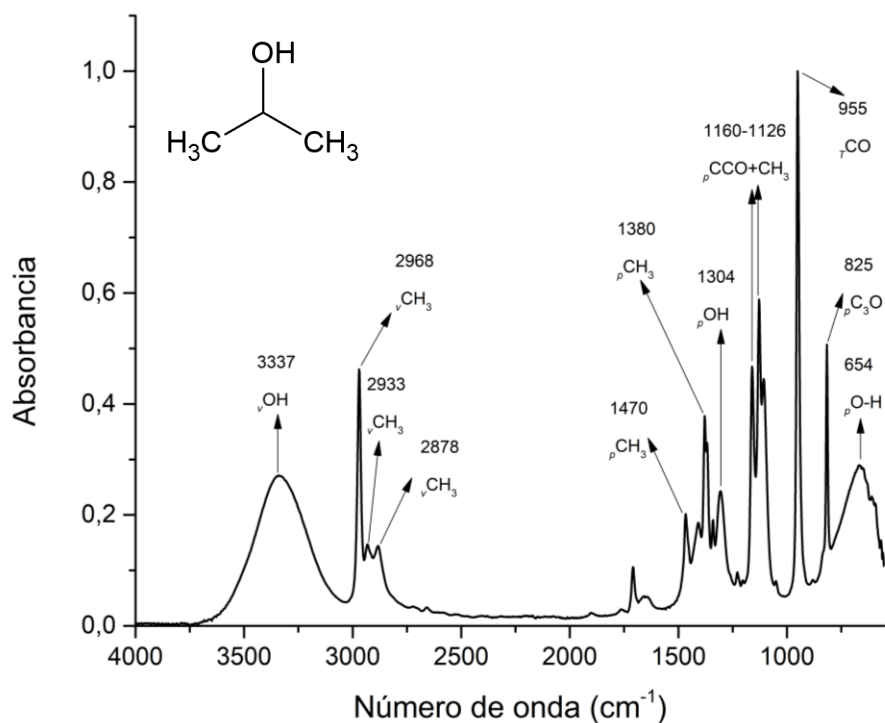
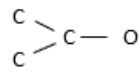


Figura 16. Espectro ATR-FTIR del alcohol isopropílico. (Fuente: Autor)

Además de las bandas principalmente mencionadas se presentaron bandas asociadas a vibraciones de tensión, flexión, balanceo dentro y fuera del plano especialmente en los enlaces metilo (Larkin, 2018), tal como se encuentra en la Tabla 8.

Tabla 8. Asignaciones al espectro ATR-FTIR del alcohol isopropílico. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm ⁻¹)	Asignación
3337	Estiramiento OH
2968-2933	Estiramiento simétrico CH ₃
2878	Estiramiento asimétrico CH ₃
1470	Flexión CH ₃
1380	Balanceo dentro del plano CH ₃
1304	Tensión OH
1160	Balanceo fuera del plano C-C-O
1126	Balanceo fuera del plano CH ₃
955	Tensión CO
825	Tensión 
654	Flexión -O-H

BUTANOL

En base a lo mencionado anteriormente, el espectro del butanol, como se aprecia en la Figura 17, mostró las bandas generadas por las vibraciones entre enlaces CH_3 y CH_2 de la cadena carbonada del butanol, dichas bandas se encuentran en la región menor a 3000 cm^{-1} y presentan mayor intensidad en comparación al metanol y alcohol isopropílico; además tiene mayor definición en las bandas debido a que hay una mejor separación por las vibraciones del metilo y metileno de la cadena carbonada, en 1112 cm^{-1} se encuentra una banda de baja intensidad que es representativa de los enlaces CCC-O de la molécula, la cual es única de la sustancia en cuestión.

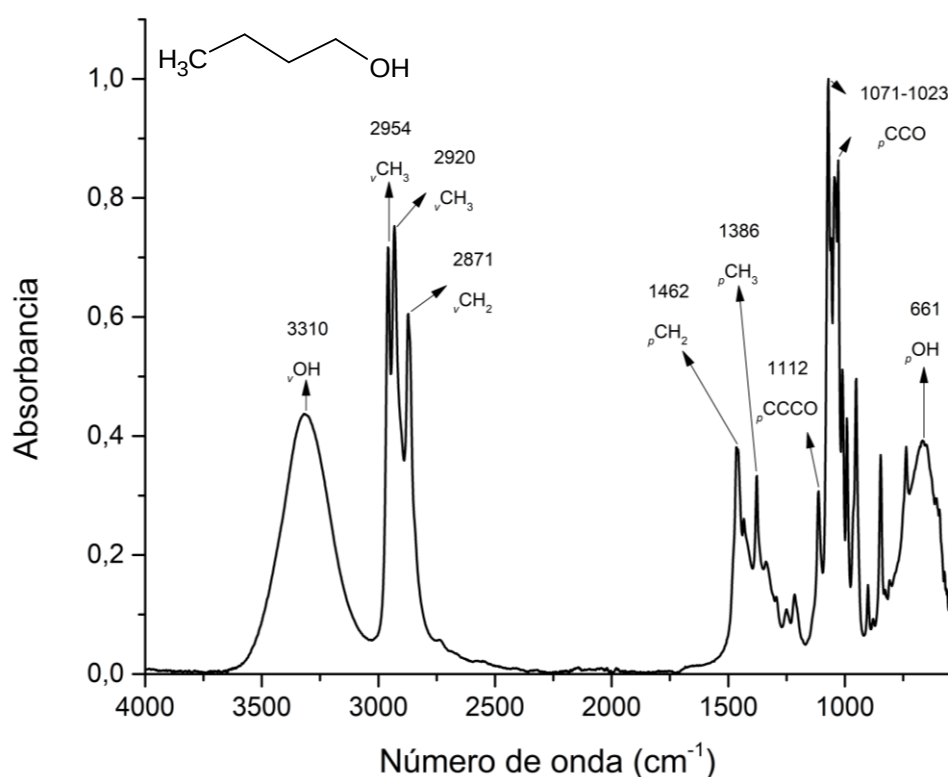


Figura 17. Espectro ATR-FTIR del butanol. (Fuente: Autor)

Al igual a los otros dos alcoholes, presentó la banda del grupo O-H con un desplazamiento mínimo de la banda en 3337 cm^{-1} y 1071 cm^{-1} , asociados, según la tabla 9, con los estiramientos O-H y balanceo fuera del plano de enlaces C-C-O de la molécula.

Tabla 9. Asignaciones al espectro ATR-FTIR del butanol. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
3337	Estiramiento OH
2968-2933	Estiramiento simétrico CH_3
2878	Estiramiento asimétrico CH_3
1470	Flexión CH_3
1380	Balanceo dentro del plano CH_3
1304	Tensión OH
1160	Balanceo fuera del plano CC-O
1126	Balanceo fuera del plano CH_3
955	Tensión CO
654	Flexión -O-H

ACETONA

En la sustancia de la acetona, se presentó la banda característica del enlace carbonilo, exactamente en 1715 cm^{-1} la cual presenta mayor intensidad comparada con las demás bandas, según las afirmaciones de Zheng y asociados, la banda del grupo carbonilo, específico de la acetona, se presenta entre el rango de 1790 cm^{-1} y 1640 cm^{-1} (Zheng et al., 2022); así mismo se observaron las bandas de absorción de baja intensidad, para las fracciones de metilo de la acetona en la región entre 2900 cm^{-1} y 3000 cm^{-1} .

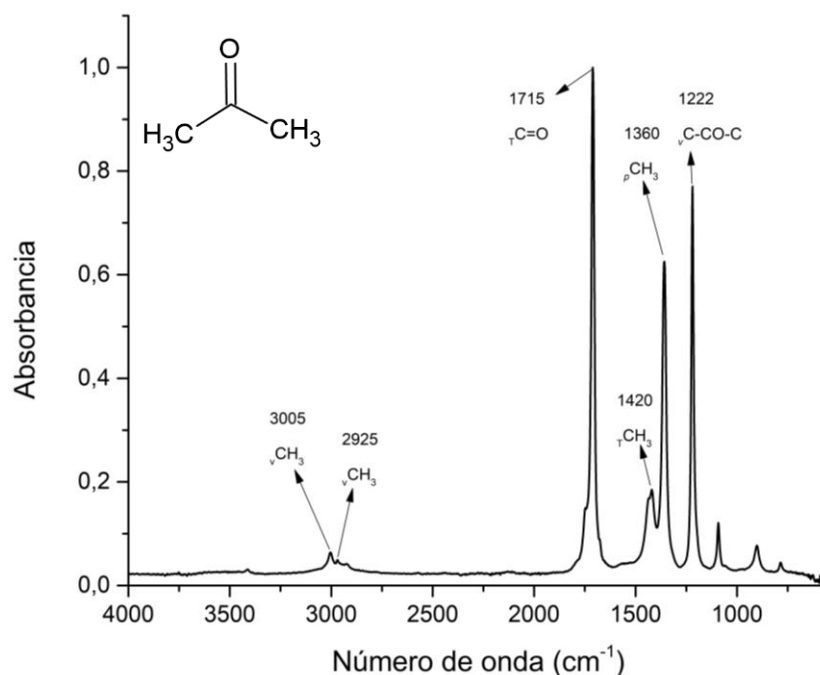


Figura 18. Espectro ATR-FTIR de la Acetona. (Fuente: Autor)

Aparte de las bandas de confirmación del metilo en 1420 cm^{-1} y 1360 cm^{-1} como se aprecia en la Tabla 10, por otro lado, se presentó una banda de considerable intensidad en 1222 cm^{-1} la cual indicó los enlaces del carbonilo con los carbonos beta de la molécula.

Tabla 10. Asignaciones al espectro ATR-FTIR de la Acetona. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
3005	Estiramiento asimétrico CH_3
2925	Estiramiento simétrico CH_3
1715	Tensión $\text{C}=\text{O}$
1420	Balanceo fuera del plano CH_3
1360	Balanceo dentro del plano CH_3
1222	Tensión $\text{C}-\text{CO}-\text{C}$

METIL ISOBUTIL CETONA

Si bien como en el anterior grupo de alcoholes, la metil isobutil cetona, junto con el metil etil cetona (2-butanona) y la acetona, comparten el grupo funcional entre ellas, lo que hace que sus espectros presenten ciertas similitudes, para el caso del metil isobutil cetona, su espectro (Figura 19) evidenció la presencia de bandas con mayor definición e intensidad cerca de los 3000 cm^{-1} los cuales son indicadores de los grupos metilo y metileno de la cadena alifática presente en la sustancia, la banda del estiramiento del grupo carbonilo $\text{C}=\text{O}$ en 1720 cm^{-1} , con alta intensidad, que como considera Gilbert, el espectro característico de esta sustancia presenta similitud en esta banda significativa con grupos funcionales como un éster conjugado y ácidos carboxílicos, pero no se pueden confirmar la presencia de estas bandas debido a la ausencia de otras bandas relacionadas a estos grupos funcionales (Gilbert, 2017).

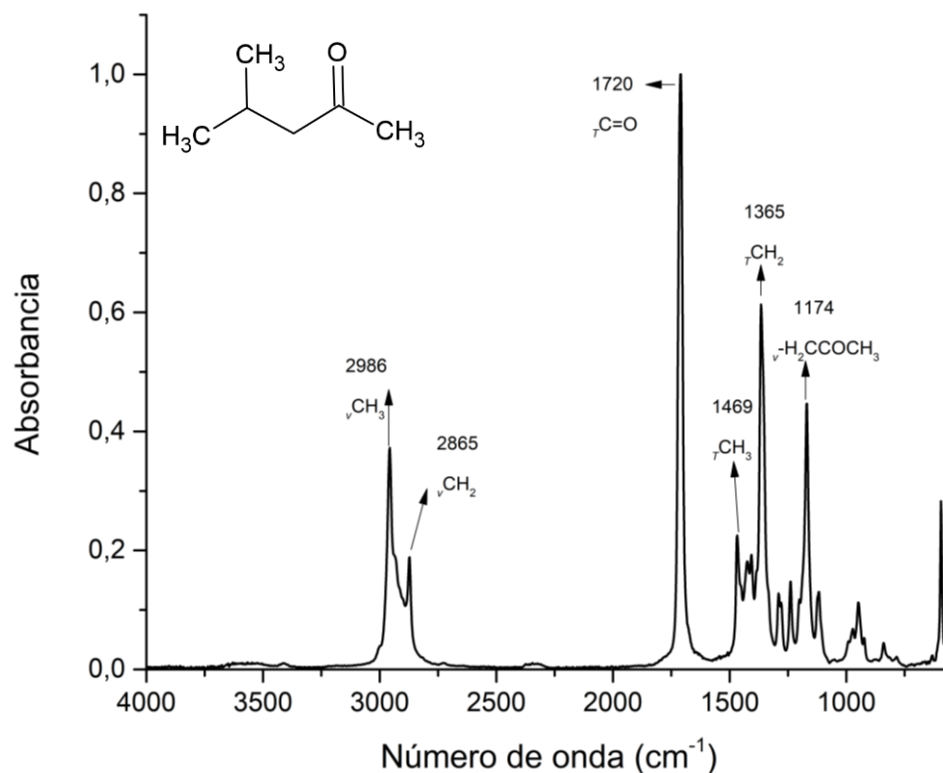


Figura 19. Espectro ATR-FTIR del metil isobutil cetona. (Fuente: Autor)

Basado en las bandas de las sustancias se puede deducir que la banda alrededor de 1174 cm^{-1} es fundamental para diferenciar la acetona del metil isobutil cetona, ya que esta es indicativa de los enlaces entre el metilo, metileno y el carbonilo de la estructura química de tal sustancia.

Tabla 11. Asignaciones del espectro de Isobutil metil cetona. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
2986	Estiramiento Asimétrico CH_3
2865	Estiramiento simétrico CH_2
1720	Tensión $\text{C}=\text{O}$
1469	Tensión CH_3
1365	Tensión CH_2
1174	Estiramiento asimétrico $\text{H}_2\text{C}-\text{CO}-\text{CH}_3$

METIL ETIL CETONA

También conocida como 2-butanona, la metil etil cetona, en similitud con las sustancias anteriormente descritas presentó múltiples bandas de absorción relacionadas con estiramientos simétricos y asimétricos de los enlaces C-H como lo representa la Figura 20, con la particularidad enmarcada en su intensidad, si bien, presenta mayor intensidad en la misma región que la cetona, al contrastarla con la del metil isobutil cetona es clara la diferencia, factor por el cual permitirá diferenciar esta serie de sustancias con similitudes.

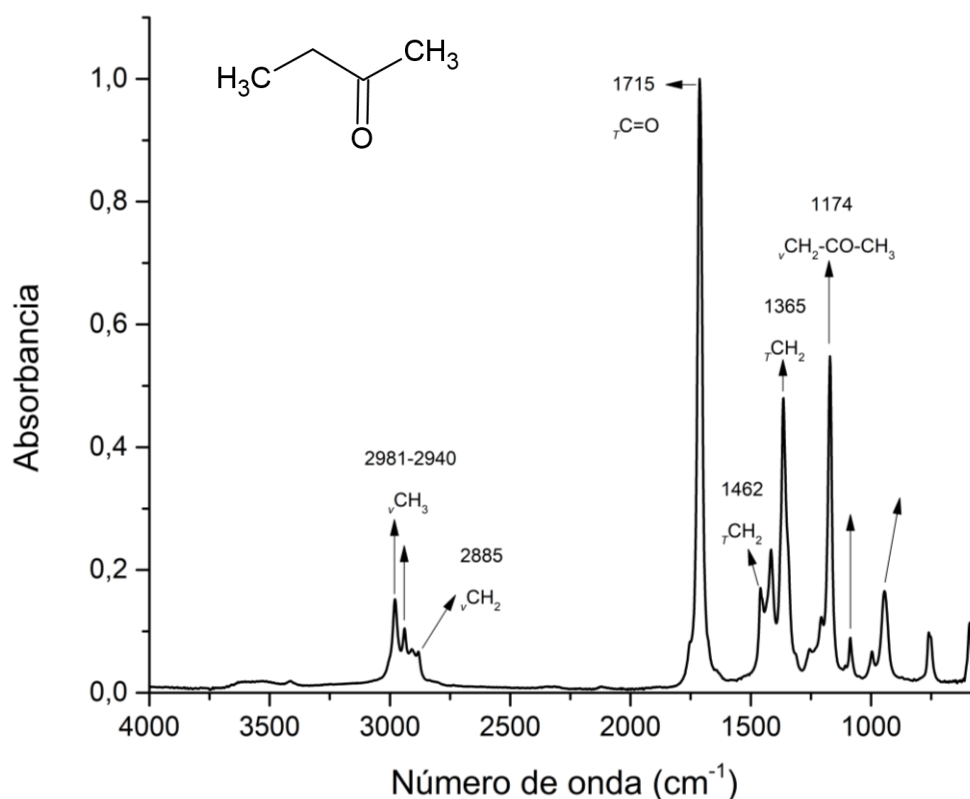


Figura 20. Espectro ATR-FTIR de la metil etil cetona. (Fuente: Autor)

En contraste al documento complementario de la investigación llevada por Hettiarachchi & Grassian, el espectro de la metil etil cetona presenta significativas similitudes con las bandas del espectro obtenido en esta investigación, esto en base a los números de onda representativos de los grupos metilo, metileno y carbonilo que son esenciales para identificar la sustancia (Hettiarachchi & Grassian, 2023); las bandas de absorción que evidencian la tensión de enlaces C-H también varían levemente en su intensidad, pero a diferencia de estas, la banda que demuestra los enlaces de la cadena carbonada adyacente al carbonilo de la estructura (Tabla 12), presenta un mínimo aumento en la intensidad.

Tabla 12. Asignaciones para el espectro ATR-FTIR de la metil etil cetona. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
2986	Estiramiento Asimétrico CH_3
2865	Estiramiento simétrico CH_2
1720	Tensión $\text{C}=\text{O}$
1469	Tensión CH_3
1365	Tensión CH_2
1174	Estiramiento asimétrico $\text{H}_2\text{C}-\text{CO}-\text{CH}_3$

ACETATOS

En los laboratorios de química de la Fiscalía General de la Nación se ha presentado una problemática en el análisis e identificación de los 5 acetatos controlados en el territorio nacional, (Acetato de Butilo, Acetato de Etilo, Acetato de isobutilo, Acetato de Isopropilo y Acetato de n-propilo), esta problemática se asocia a la superposición de las bandas de absorción características de las moléculas, que si se tiene en consideración, estos ésteres alifáticos varían estructuralmente solo en las cadenas carbonadas y ramificaciones presentes en cada molécula; basado en lo anterior, sus espectros ATR-FTIR de primer orden, presentan una alta similitud, como se aprecia en la Figura 21; aparte del espectro que representa la similitud de los acetatos, en el anexo 3 se encuentran individualmente, considerando que las asignaciones son iguales en el orden cero.

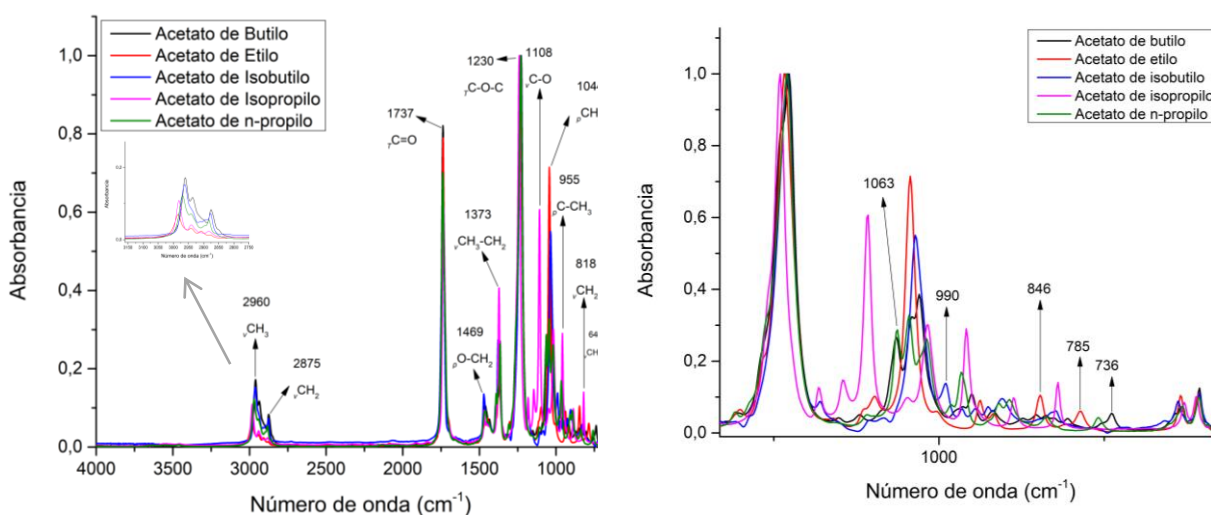


Figura 21. Espectro ATR-FTIR de Acetatos de primer orden y zoom en región de huella dactilar. (Fuente: Autor)

Haciendo un análisis visual a los espectros obtenidos de acetatos, se lograron identificar las bandas más significativas, que según literatura, permite identificar ésteres de cadenas abiertas; en principio se observaron las bandas cercanas a 3000 cm^{-1} las cuales corresponder a las cadenas carbonadas presentes en sus estructuras, se detalló que existen diferencias concernientes a las intensidades, especialmente en la banda de 2960 cm^{-1} la cual, en orden de mayor a menor intensidad se organizaron así: acetato de butilo > acetato de isobutilo > acetato de n-propilo > acetato de isopropilo y acetato de etilo el cual tuvo la menor intensidad de absorción, esto puede estar sujeto a las cadenas carbonadas, que si se consideran sus estructuras (Figura 22) el acetato de etilo es la sustancia con menor presencia de grupos metilo de los acetatos.

En 1737 cm^{-1} se presenta la banda de absorción del grupo carbonilo donde se observó una alta intensidad, que es común en estas sustancias; para los enlaces $\text{O}-\text{CH}_2$ se presentó la banda en 1469 cm^{-1} con baja intensidad, más adelante se observó la representación de las vibraciones de balanceo en el plano de las fracciones metilo y etilo de las respectivas estructuras (Socrates George, 2004).

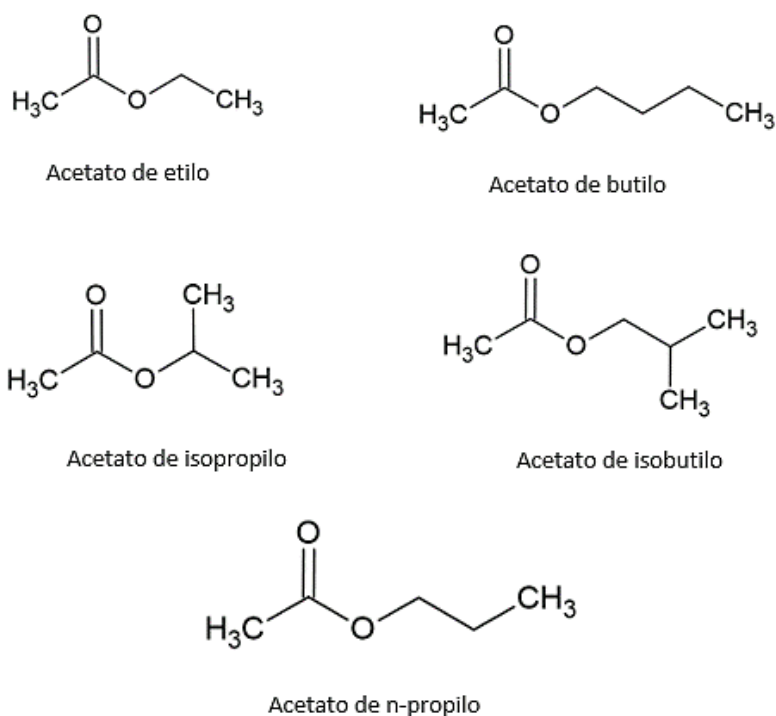


Figura 22. Estructuras de acetatos. (Fuente: Autor)

Otra banda en la que presentan similitudes el grupo de acetatos analizados fue la de 1230 cm^{-1} la cual es indicativa de la tensión C-O-C, banda que es significativamente importante al momento de identificar estas sustancias, en 1108 cm^{-1} se observó una banda de intensidad media, la cual indicó enlace C-O y fue solo el acetato de isopropilo que la presentó en el espectro, gracias a dicha banda, junto con las presentadas en 955 y 818 cm^{-1} que representan los balanceos C-CH₃ y del grupo CH₂ (Pretsch et al., 2009), se pudo diferenciar de los demás acetatos y estas mismas serán clave para identificar esta sustancia controlada. Por otra parte, con un zoom realizado al espectro en la región entre 1300 cm^{-1} y 550 cm^{-1} se observaron cinco bandas en 1063 cm^{-1} que se presenta únicamente para el acetato de butilo y n-propilo, así mismo se presentaron las bandas propias de los demás acetatos con una baja intensidad que servirán de base para diferenciar las distintas muestras de acetatos.

En la tabla 13 se pueden observar las asignaciones correspondientes para las bandas representativas de los acetatos, como las bandas que se ubicaron en 640 cm^{-1} y 601 cm^{-1} las cuales representan el balanceo fuera y en el plano de la fracción esquelética de los ésteres, la cual comprende de los enlaces entre el metilo unido al carbonilo de sus estructuras (Larkin, 2018), estas bandas aunque como se mencionaron sus bajas intensidades, son significativas en la información espectral de los acetatos estudiados.

Tabla 13. Tabla de asignaciones del espectro ATR-FTIR de Acetatos. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
2960	Estiramiento Asimétrico CH ₃
2875	Estiramiento simétrico CH ₂
1737	Tensión C=O
1469	Tensión asimétrica O-CH ₂
1373	Estiramiento CH ₃ -CH ₂
1230	Tensión asimétrica C-O-C
1108	Tensión C-O
1044	Balanceo CH ₃
955	Balanceo C-CH ₃
818	Balanceo fuera del plano CH ₂
640-601	Balanceo dentro y fuera del plano del grupo éster

Teniendo en cuenta que el acetato de isopropilo pudo identificarse sin problema con el espectro de primer orden, para la identificación de los demás acetatos se recurrió a realizar análisis de la primera y segunda derivada de los acetatos restantes con el fin de encontrar

diferencias clave en sus bandas representativas. Es por tal razón que se inspeccionó el espectro de primera derivada (Figura 23). Con la intención de verificar las diferencias espectrales entre los acetatos y se procedió a realizar un zoom al espectro de primera derivada, específicamente en la región asociada a las bandas de estiramientos $\text{CH}_3\text{-CH}_2$, donde se encontró que en las muestras de acetatos, en su punto de máxima absorción en cero, no presenta superposición de las bandas, lo que permiten la diferenciación de las muestras; también se encontró que en 1383 cm^{-1} se presenta la banda del acetato de isobutilo, también cerca de la misma se encuentra la banda de acetato de etilo, que también presenta la banda con mayor intensidad en 1369 cm^{-1} la cual resalta entre los demás acetatos, así mismo en 1368 cm^{-1} se presentaron juntas las bandas del acetato de butilo y acetato de n-propilo en referencia de las pendientes máximas y mínimas de las bandas de absorción.

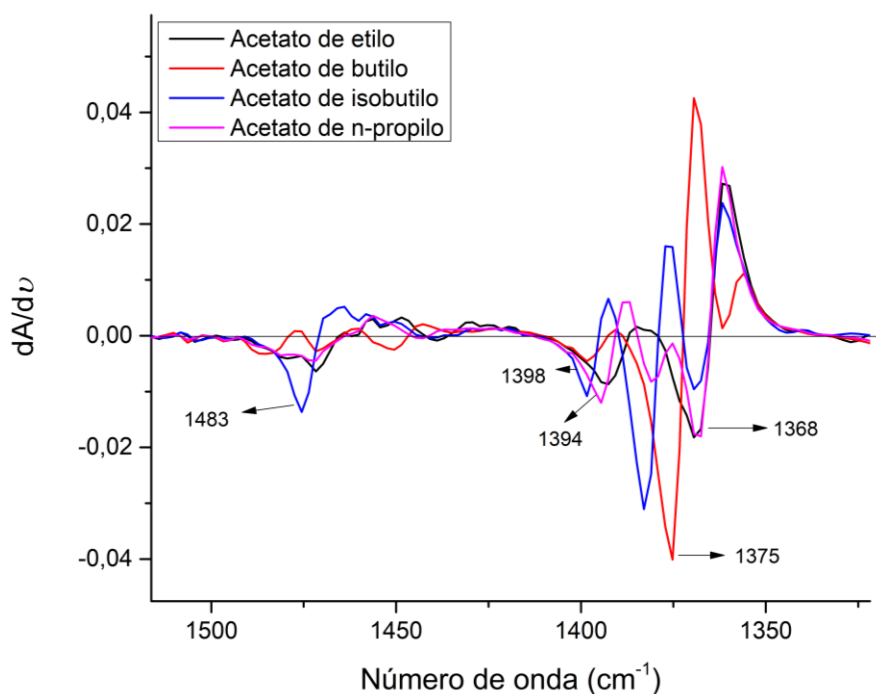


Figura 23. Espectro ATR-FTIR primera derivada de acetatos. (Fuente: Autor)

Pues bien, las principales diferencias encontradas en el espectro de la Figura 23 son las variaciones del número de onda para este tipo de vibración en los acetatos como se representa en la Tabla 14 que, según la literatura, esta variabilidad puede estar sujeta con las diferencias estructurales de las sustancias de estudio; así mismo se observó que las bandas de la región entre 1400 cm^{-1} y 1350 cm^{-1} no presentaron superposición de las mismas lo cual será clave para la identificación de los distintos acetatos en cuestión. Por

otra parte, se encontró una banda en 1483 cm^{-1} que se presentó exclusivamente en el acetato de isobutilo sin superposición de la misma con las demás muestras en cero, esta se relaciona con el balanceo fuera del plano del enlace O-CH_2 .

Tabla 14. Tabla de asignación de frecuencias en primera derivada para diferenciación de acetatos. (Fuente: Autor)

Acetato	Número de onda de la banda asociada a estiramiento $\text{CH}_2\text{-CH}_3$ (cm^{-1})
Acetato de butilo	1368
Acetato de etilo	1375 - 1369
Acetato de isobutilo	1383
Acetato de n-propilo	1361

CLOROFORMO

Las bandas presentadas por el espectro ATR-FTIR del cloroformo (Figura 24), sobresalen tres principalmente, una ubicada alrededor de 745 cm^{-1} la cual representa los estiramiento del enlace C-Cl de esta sustancia, esta banda concuerda con lo informado en una investigación de 2023 donde evaluaron el efecto del solvente en el comportamiento del o-cresol, allí se pudo determinar la presencia de la banda cercana a los 770 cm^{-1} asociada al enlace mencionado (Lasalle et al., 2023); así mismo es conocido que en la región comprendida entre $700\text{-}800\text{ cm}^{-1}$ se presenta este tipo de enlaces C-Cl (Téllez Mesa, 2019), dicho enlace es muy importante en este halogenuro de alquilo y va a ser clave para la identificación de esta sustancia en futuras investigaciones.

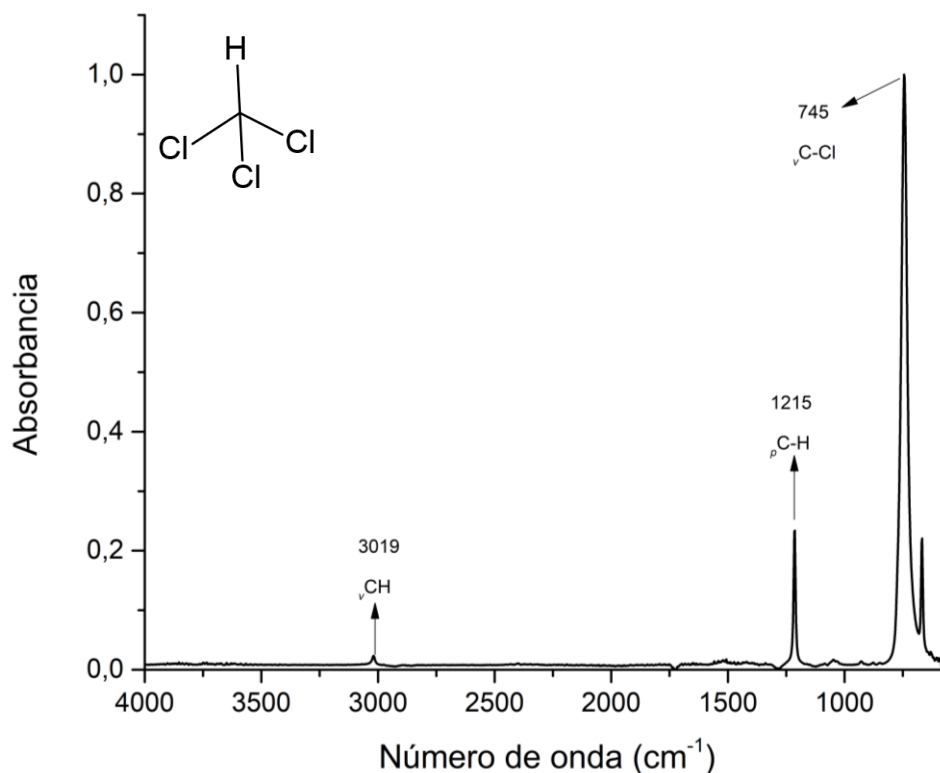


Figura 24. Espectro ATR-FTIR del cloroformo. (Fuente: Autor)

Aparte de la banda de los estiramientos del carbono con el halogenuro, existen dos bandas que son asignadas a la flexión de la flexión y estiramiento C-H del cloroformo como se ilustra en la tabla 15. Estas asignaciones se corroboran con la interpretación que da al espectro del cloroformo en mezclas variadas con alcohol, en la investigación de Kutsyk y asociados, donde según su interpretación dada al libro publicado por T-Shimanoushi, afirman que la banda en 1215 cm⁻¹ corresponde a las vibraciones de flexión del cloroformo (Kutsyk et al., 2022), así mismo en la gráfica 5 donde muestran los perfiles espectrales del cloroformo, alcohol y demás sustancias en análisis, se logra apreciar una banda de baja intensidad delante de 3000 cm⁻¹ la cual, según Lasalle y colaboradores indican que pertenece al estiramiento C-H de la sustancia en cuestión (Lasalle et al., 2023).

Tabla 15. Asignaciones para el espectro ATR-FTIR del cloroformo. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm ⁻¹)	Asignación
3019	Estiramiento C-H
1215	Flexión C-H
745	Estiramiento C-Cl

PERMANGANATO DE POTASIO

El caso particular del permanganato de potasio, uno de los principales sustancias químicas esenciales en la producción de cocaína en la fase de la obtención de la cocaína base, presentó un espectro con una banda de alta intensidad como se aprecia en la figura 25, esta permitió identificar el estiramiento en los enlaces en el ion MnO_4^- , está ubicada en un número de onda aproximado a 887 cm^{-1} .

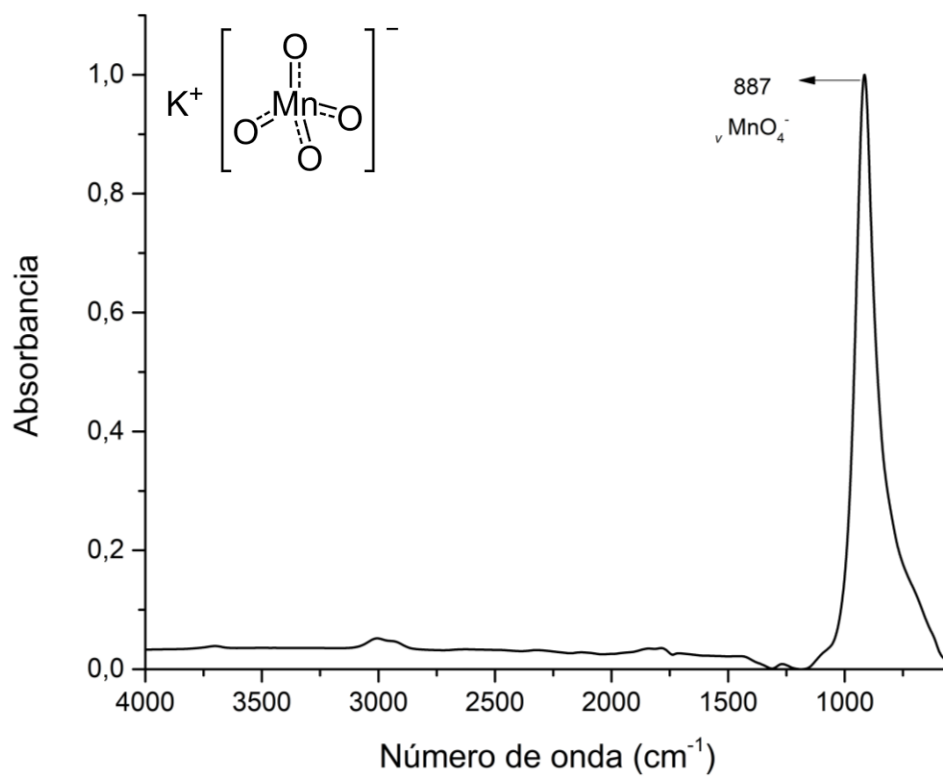


Figura 25. Espectro ATR-FTIR del permanganato de potasio. (Fuente: Autor)

Basado en la información extraída del libro Análisis Instrumental de Robinson, la banda correspondiente a las vibraciones de estiramientos del ion MnO_4^- se presenta en un nivel de alta intensidad y en la región cercan a 900 cm^{-1} (Kenneth A, 2001), dato que concuerda con el proporcionado con el espectro, y que se reitera en la tabla 16.

Tabla 16. Asignaciones para el espectro ATR-FTIR del permanganato de potasio. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
887	Estiramiento MnO_4^-

TOLUENO

El tolueno, presentó una serie de bandas, que evidencian las absorciones resultantes de las vibraciones presentes en los enlaces del anillo aromático y el grupo metilo, presentes en su estructura molecular, especificando, en la figura 26 se presentaron las bandas asociadas a los estiramientos simétricos y asimétricos de enlaces CH y CH₃ en regiones como 3086, 3029, 2920 y 2871 cm⁻¹ respectivamente, así mismo se presentaron las bandas de 1605, 1502, 694 cm⁻¹ que según la interpretación de Yin en 2019, están relacionados con los estiramientos y las vibraciones del anillo aromático (Yin et al., 2019).

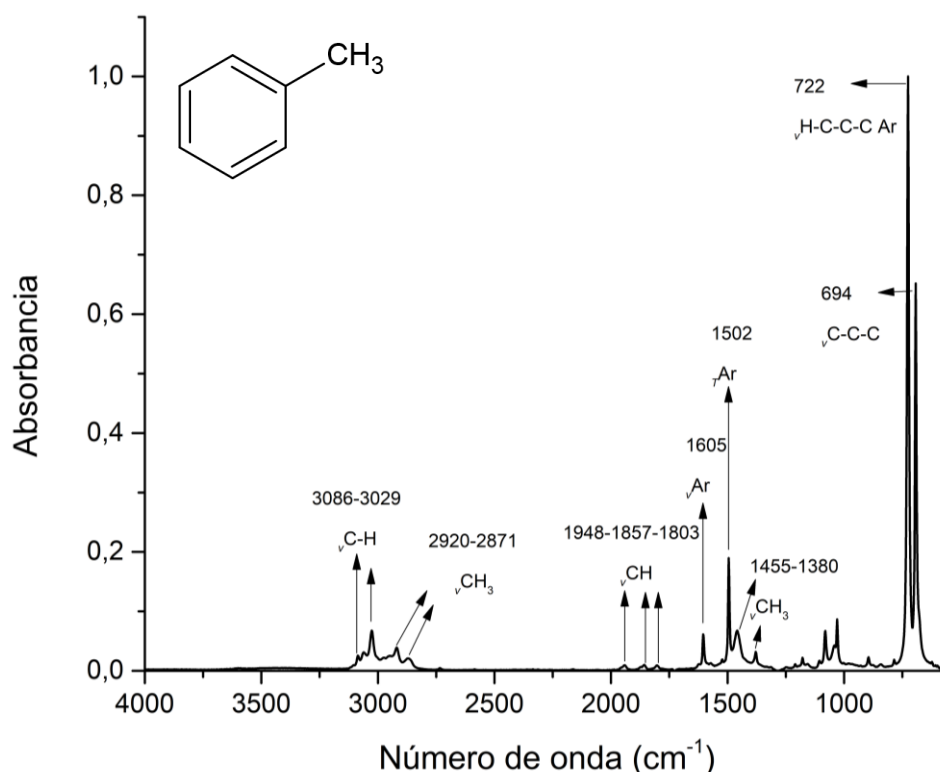


Figura 26. Espectro ATR-FTIR del tolueno. (Fuente: Autor)

Así mismo, se presentaron las bandas características de la mono sustitución del anillo aromático justamente en 1948, 1857 y 1803 cm⁻¹ con una muy baja intensidad (Larkin, 2018). En la tabla 17 se muestran claramente las asignaciones dadas al espectro del tolueno, donde así mismo, sobresale una banda de significativa intensidad, la cual está en el rango de 722 cm⁻¹, la cual indica el balanceo H-C-C-C de la estructura aromática del tolueno (Kinaytürk et al., 2023), banda que se corroboró con la investigación de Park y Kim donde indican que la banda alrededor de 730 cm⁻¹ es indicativa del balanceo fuera del plano del enlace C-H del tolueno (Park & Kim, 2023).

Tabla 17. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del tolueno. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm ⁻¹)	Asignación
3086-3029	Estiramiento Simétrico y Asimétrico C-H Aromático
2920-2871	Estiramiento Simétrico y Asimétrico CH ₃
1948-1857-1803	Balanceo C-H Aromático
1605	Estiramiento C-C Aromático
1502	Tijereteo C-H Metino
1455-1380	Balanceo dentro y fuera del plano CH ₃
722	Balanceo H-C-C-C Aromático
694	Balanceo fuera del plano C-C-C Aromático

METABISULFITO DE SODIO

El caso particular del metabisulfito de sodio, que comúnmente es utilizado para el proceso de blanqueamiento del clorhidrato de cocaína, eliminando cualquier exceso de otras sustancias químicas (Aduanas, 2022), esta sustancia presentó un espectro sin información luego de 1500 cm⁻¹, mostrando cinco bandas específicas de la molécula inorgánica, sobresaliendo principalmente la que está ubicada cerca de 1160 cm⁻¹, la cual es indicativa del estiramiento S=O; así mismo se observó la banda ubicada en 1058 cm⁻¹ la cual muestra, según la tabla de asignaciones, el estiramiento S-O.

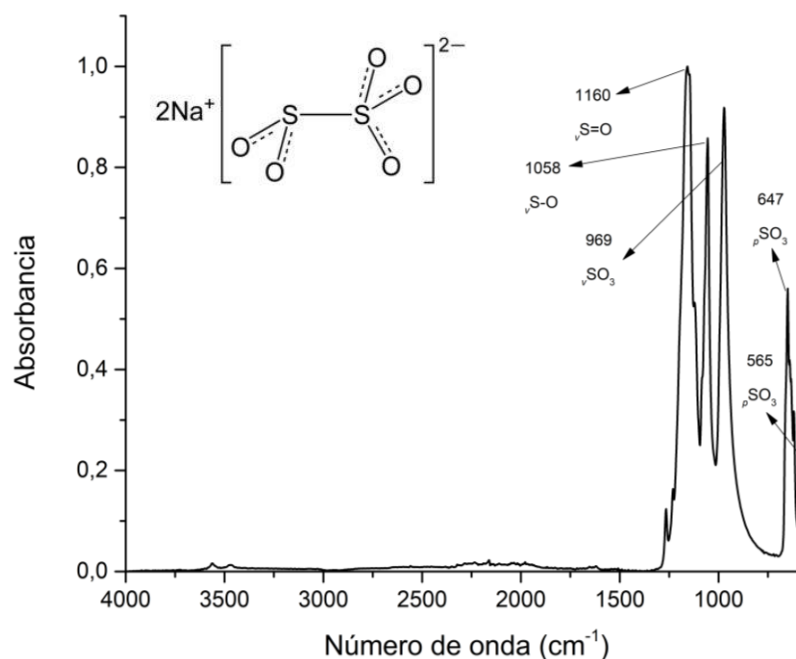


Figura 27. Espectro ATR-FTIR del metabisulfito de sodio. (Fuente: Autor)

Otra forma de vibración se presenta en 969 cm^{-1} donde se apreció la banda con menor intensidad que muestra la tensión del grupo sulfito presente en la molécula de esta sustancia, esto basado en las afirmaciones de Yu y contribuidores donde especifican estas tres bandas asociadas a los enlaces principales de esta sustancia (Yu et al., 2022), tal como se observa en la Figura 27. Un tanto aparte se encontraron dos bandas representativas de los balanceos dentro y fuera del plano del ion sulfito SO_3^- justamente en 565 cm^{-1} y 647 cm^{-1} con mayor intensidad en la banda.

Tabla 18. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del metabisulfito de sodio. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
1160	Estiramiento S=O
1058	Estiramiento S-O
969	Tensión SO_3
647	Balanceo dentro del plano SO_3
565	Balanceo fuera del plano SO_3

BISULFITO DE SODIO

Teniendo en cuenta que según las indicaciones de la Fiscalía, en los últimos años las facciones delictivas están utilizando el nombre del bisulfito de sodio (sustancia no controlada) para camuflar el contenido de metabisulfito de sodio (sustancia controlada) con el fin de evadir los controles de las autoridades competentes, es por ello que se agregó el análisis ATR-FTIR de esta sustancia, para tener respaldo en cuanto a las diferencias entre estas sustancias en una situación como la anteriormente mencionada.

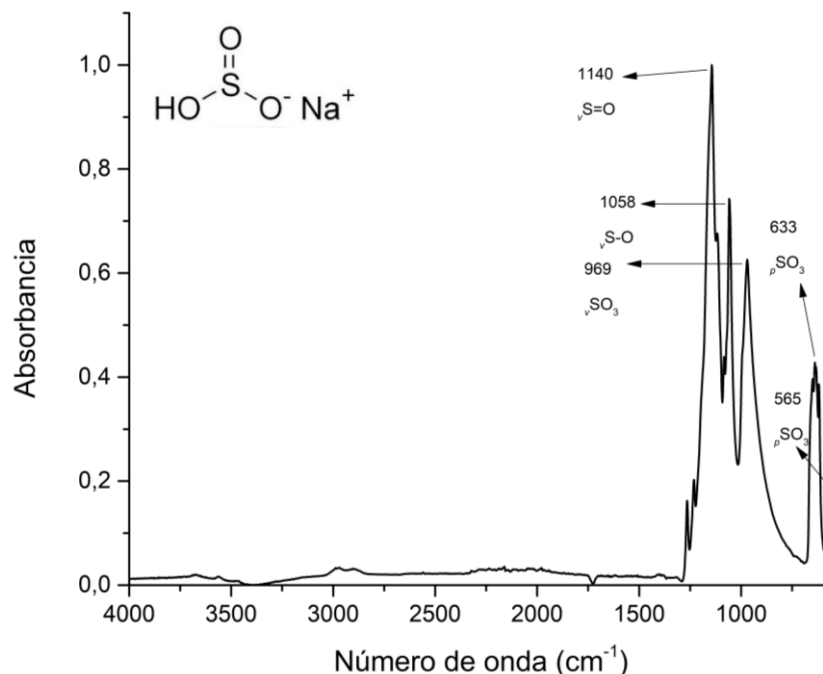


Figura 28. Espectro ATR-FTIR del bisulfito de sodio. (Fuente: Autor)

Partiendo de lo observado en el espectro de la figura 28 se identificó una variación en la banda correspondiente al estiramiento S=O de la molécula, en el caso del bisulfito la banda se presenta alrededor de 1140 cm⁻¹ a diferencia del metabisulfito que la misma banda la presenta en 1160 cm⁻¹. Otra banda indispensable para diferenciar las dos sustancias, es la banda de 969 cm⁻¹ la cual es atribuible a la tensión S-O y en el caso del bisulfito de sodio presenta un aumento significativo en su intensidad, en comparación con el metabisulfito de sodio, siendo este último el que presenta una intensidad media en dicha banda. Otro aspecto a destacar es el leve desplazamiento de la banda asociada con el balanceo dentro del plano del SO_3^- , que en el bisulfito de sodio se presentó en 633 cm⁻¹ y puede tener relación con el cambio en la estructura, que si bien, son los mismos grupos funcionales de las dos moléculas, hay un cambio en la cantidad del ion presente en la estructura mencionada en el último espectro.

CORRUO DE CALCIO

El espectro obtenido del cloruro de calcio, presentó bandas particulares ya que en las regiones en las que se presentaron son características del espectro de agua, teniendo variaciones en sus formas de absorción, ya que no presenta la amplia frecuencia que comúnmente presenta la banda de las vibraciones de los enlaces O-H de la molécula.

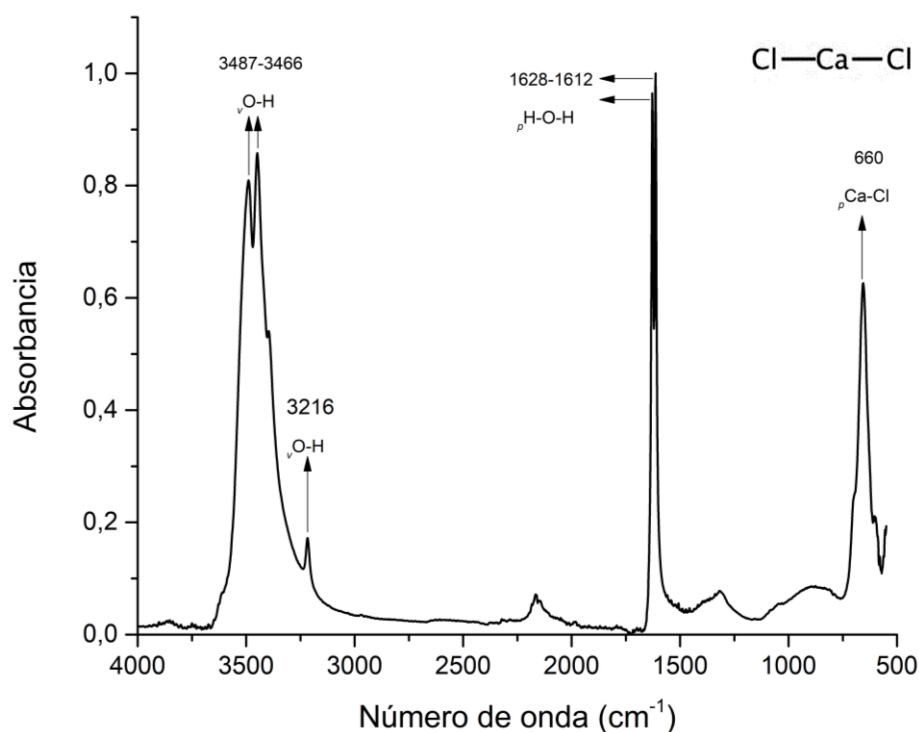


Figura 29. Espectro ATR-FTIR del cloruro de calcio. (Fuente: Autor)

Partiendo de lo anterior y como se observa en la Figura 29, las bandas de absorción asignadas a los estiramientos asimétricos y simétricos de la molécula del agua se ubican en 3487 cm⁻¹, 3466 cm⁻¹ y 3216 cm⁻¹ respectivamente, retomando la afirmación inicial, las bandas de absorción del agua presentan una variación en su frecuencia debido a la forma cristalina del agua en cuanto a la hidratación del cloruro de calcio, así mismo como se aprecia en la Tabla 19, se presentó el estiramiento simétrico del mismo enlace.

Tabla 19. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del cloruro de calcio. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm⁻¹)	Asignación
3487-3446	Estiramiento Asimétrico O-H
3216	Estiramiento Simétrico O-H
1628-1612	Balanceo H-O-H
660	Vibración de la red cristalina

Por otra parte, se presentaron un par de bandas de alta intensidad en la región de 1628 y 1612 cm^{-1} las tuvieron el mismo comportamiento que las bandas del estiramiento simétrico de O-H, ya que no es común la presencia de dos bandas en el espectro del agua, dicho comportamiento se correlaciona con la interacción de los enlaces (O-H---O y O-H---Cl) (Karunadasa, 2019), lo anterior se afirma teniendo en cuenta que el cloruro de calcio es un compuesto altamente higroscópico (Wu et al., 2024). Por último se observó una banda de intensidad media en 660 cm^{-1} la cual es representativa de las vibraciones de la red cristalina del compuesto inorgánico (Farmer, 1974) y podrá ser de gran utilidad en la identificación del compuesto.

CARBONATO DE SODIO

Partiendo del hecho de que el carbonato de sodio, es comúnmente utilizado en el secado del sulfato de cocaína, son comunes las incautaciones de esta sustancia controlada; su espectro ATR-FTIR (Figura 30) mostró bandas importantes para su identificación, por ejemplo la que se presenta en la región de 1455 cm^{-1} la cual permite deducir la presencia de estiramientos del ion carbonato CO_3^{2-} (Royer et al., 2024), al igual en 832 cm^{-1} se presentó otra banda con alta intensidad que es representativa del balanceo fuera del plano tal como se describe en la Tabla 20; alrededor de 1277 cm^{-1} se presentó una banda de alta intensidad la cual es indicativa de los estiramientos C-O del ion carbonato, teniendo en cuenta que dicha banda se presenta en la región entre 1100 cm^{-1} - 1500 cm^{-1} . Una banda que también es representativa del ion en cuestión, es la que según Joshi y colaboradores, presente en 694 cm^{-1} la cual asociaron con balanceo en el plano presente en el compuesto (Joshi et al., 2022).

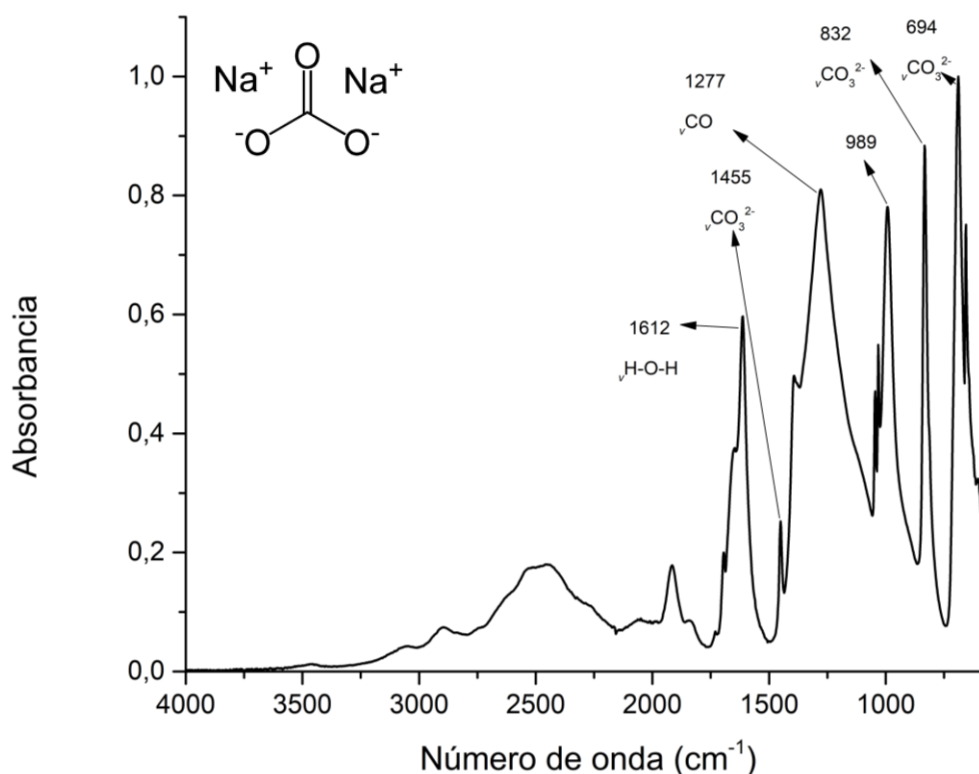


Figura 30. Espectro ATR-FTIR del carbonato de sodio. (Fuente: Autor)

Teniendo en cuenta que el carbonato de sodio es higroscópico, se observó la banda en 1612 cm^{-1} la cual en la descripción del cloruro de calcio se asignó en los balanceos H-O-H de la molécula del agua y partiendo de lo reportado en la investigación de Djordjevic donde realizaron un seguimiento de la activación del carbonato de sodio anhidro, encontrando que las bandas asociadas con las interacciones del agua con las estructuras cristalinas del carbonato, presentaban aumentos en las bandas asociadas al agua y específicamente para el interés de esta investigación, la banda de 1645 cm^{-1} (Djordjevic et al., 2022).

Tabla 20. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del carbonato de sodio. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
1612	Balanceo H-O-H
1455	Estiramientos CO_3
1277	Estiramiento C-O
832	Balanceo fuera del plano CO_3
694	Balanceo en el plano CO_3

ACEITE COMBUSTIBLE PARA MOTOR (A.C.P.M)

Siendo uno de los productos principalmente empleados en la fase inicial de la extracción de los alcaloides de la hoja del *Erythroxylum coca*, el ACPM es uno de los productos químicos mayormente incautados en laboratorios de la fabricación de clorhidrato de cocaína (Armada de Colombia, 2024), es por ello la importancia de poder identificar rápidamente este compuesto mediante ATR-FTIR. El espectro obtenido presentó las bandas de 2920 cm^{-1} y 2850 cm^{-1} que son producto de las vibraciones $\text{CH}_2\text{-CH}_3$ presentes en las cadenas alifáticas de este producto derivado del petróleo tal como se divide en la Figura 31, del mismo modo se observaron las bandas de balanceo dentro del plano de la cadena alifática, tal como lo describe Msimanga y colaboradores, en un estudio ATR-FTIR de combustibles Diesel en el estado de Georgia Estados Unidos (Msimanga et al., 2022).

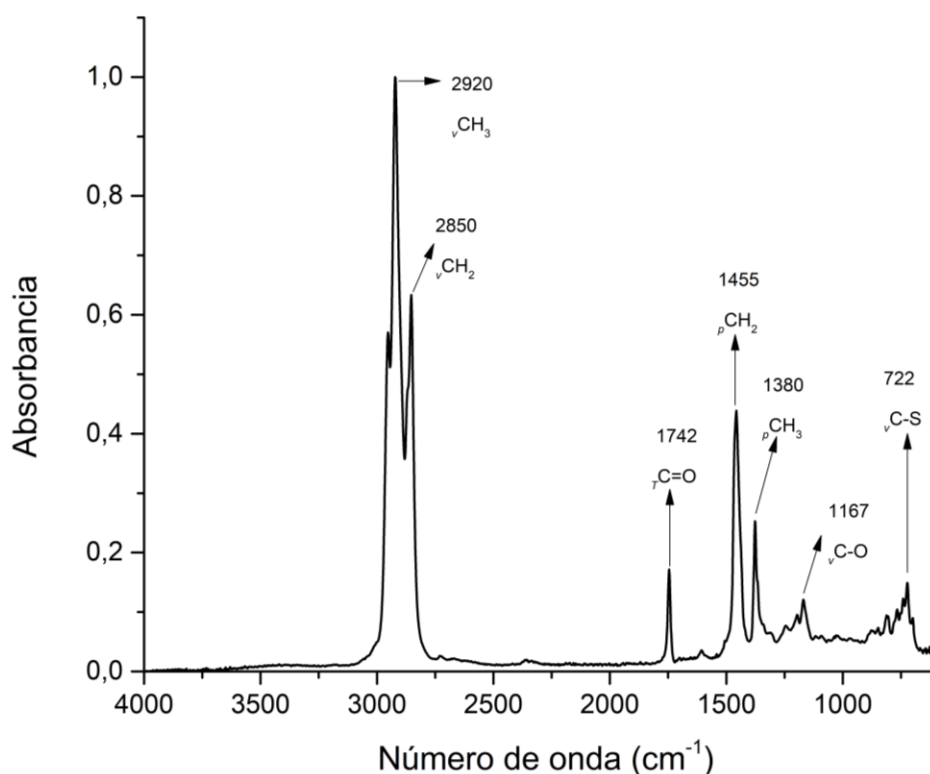


Figura 31. Espectro ATR-FTIR del ACPM. (Fuente: Autor)

Tal como reporta una investigación en 2019, se identificó la banda asociada con la tensión C=O de carbonilo (Faraguna et al., 2019) (Tabla 21), y esto se debe a la presencia de ésteres alifáticos en el combustible, esto se confirma con la banda de 1167 cm^{-1} la cual es indicativa del enlace C-O de este grupo funcional de cadena abierta; la presencia de estas bandas se asocia con la presencia de biodiesel en el combustible.

Tabla 21. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del ACPM. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm ⁻¹)	Asignación
2920	Estiramiento Asimétrico CH ₃
2850	Estiramiento simétrico CH ₂
1742	Tensión C=O
1455	Balanceo en el plano CH ₃
1380	Balanceo en el plano CH ₂
1167	Estiramiento C-O
722	Estiramiento C-S

Del mismo modo en el espectro se presentó la banda de absorción en 722 cm⁻¹ la cual es atribuida a la presencia de sulfuros en la sustancia (Nespeca et al., 2018), dichos compuestos se encuentran en gasolina y ACPM debido a que en el petróleo es común la presencia de azufre.

DISOLVENTE N° 1A.

El disolvente No 1A presentó el espectro de la Figura 32, donde se visualizan las bandas asignadas a las vibraciones asimétricas y simétricas de los grupos metilo y metileno presentes en esta mezcla de compuestos alifáticos presentes en el solvente en mención, tal como lo especifica la Tabla 20.

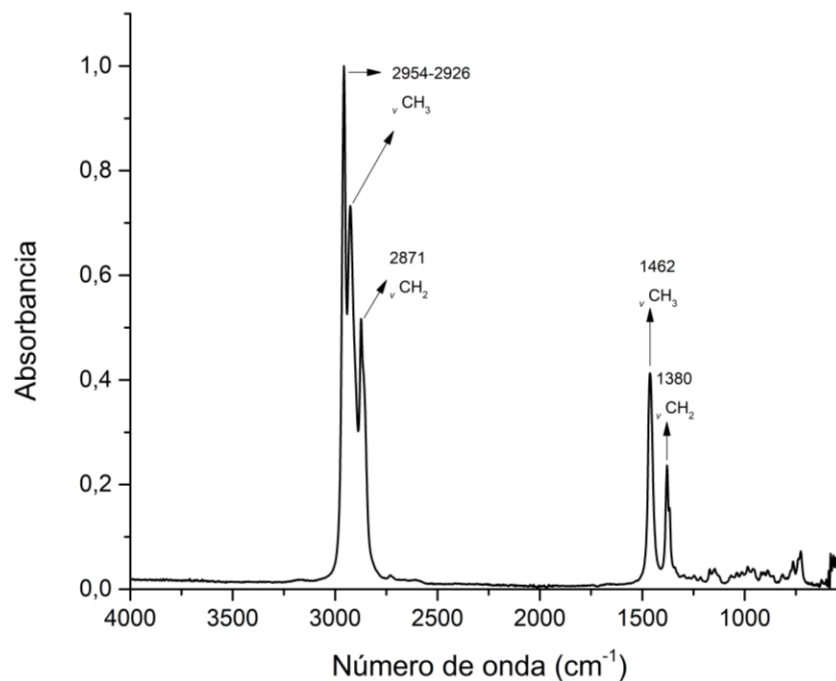


Figura 32. Espectro ATR-FTIR del disolvente No. 1A. (Fuente: Autor)

Así mismo, como se presentó en el espectro de ACPM, las bandas de balanceo en el plano de los mencionados se presentan en la región de 1462 cm^{-1} y 1380 cm^{-1} que representan una estructura lineal de la cadena carbonada (Hernández Villa, 2019).

Tabla 22. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del Disolvente No. 1A. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
2954-2926	Estiramiento Asimétrico CH_3
2871	Estiramiento simétrico CH_2
1462	Balanceo en el plano CH_3
1380	Balanceo en el plano CH_2

HEXANO

Formando parte de la estructura de la gasolina para automóviles y usado comúnmente como solvente para la extracción de compuestos orgánicos debido a su polaridad, el hexano presenta una composición de 83.6 % de carbono y 16.8 % de hidrógeno, es por tal razón que el espectro que presentó esta sustancia tiene cierta similitud con el espectro del Disolvente 1A y ACPM, teniendo en cuenta que las atribuciones principales se basan en las cadenas alifáticas (Almaraz Vega, 2015), tal como se presenta en la Figura 33.

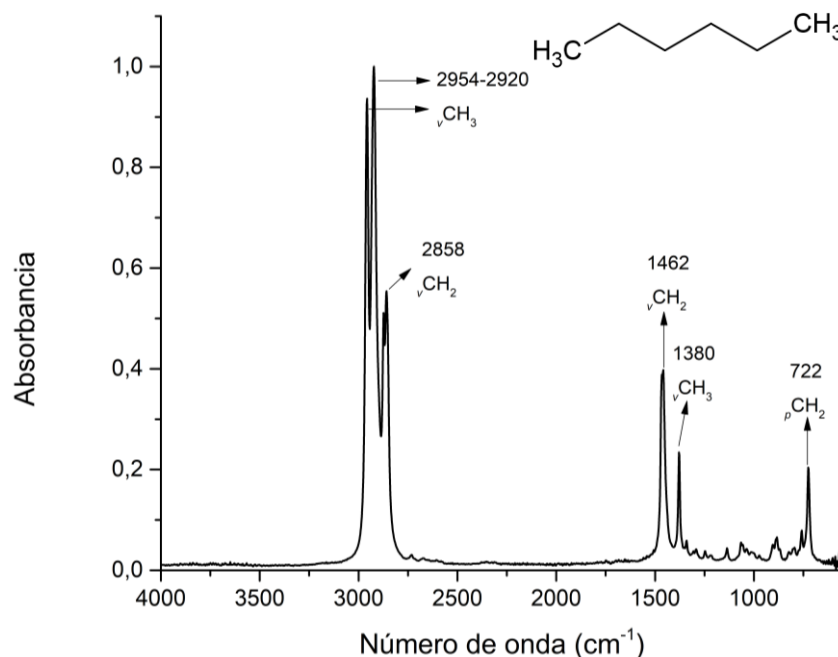


Figura 33. Espectro ATR-FTIR del hexano. (Fuente: Autor)

En cuanto a la banda de absorción en 722 cm^{-1} se puede inferir que está relacionada con el balanceo en el plano del grupo metileno (CH_2) de la cadena alifática del hexano (Larkin, 2018).

4.2.1. PREPARACIÓN DE SALES DE AMONIO PARA ANÁLISIS DE SUSTANCIAS CORROSIVAS

Como se especificó en la sección 3.5.1 de la metodología, se prepararon las sales de amonio con la finalidad de no afectar el cristal ATR del equipo con los ácidos altamente corrosivos, cabe aclarar que el sulfato de amonio (sal producto del ácido sulfúrico) fue proporcionado por la Fiscalía y en el laboratorio de Control de calidad se preparó el cloruro de amonio, el cual tuvo una apariencia cristalina, de color blanco e inoloro, que al igual que el sulfato de amonio se maceró para analizar mediante ATR-FTIR e identificar sus bandas características como se describe a continuación.

SULFATO DE AMONIO

El espectro infrarrojo de esta sustancia, producto de derivatización química del ácido sulfúrico, presentó banda de absorción de enlace O-H de la molécula del agua, cerca en la región de 3022 cm^{-1} y 2827 cm^{-1} se presentaron bandas de amplia frecuencia, las cuales se asociaron con las interacciones N-H del amonio y según un artículo del 2011, estas bandas presentan un solapamiento ya que hay presencia de agua en la muestra del sulfato de amonio (Kadam et al., 2011).

En la Tabla 23 se aprecian las asignaciones a las demás bandas, donde se describen las vibraciones de tensión N-H del amonio alrededor de 1400 cm^{-1} tal como describe el espectro puro de sulfato de amonio Méndez Alija en su investigación enfocada en el estudio de las propiedades orgánicas de aerosoles inorgánicos.

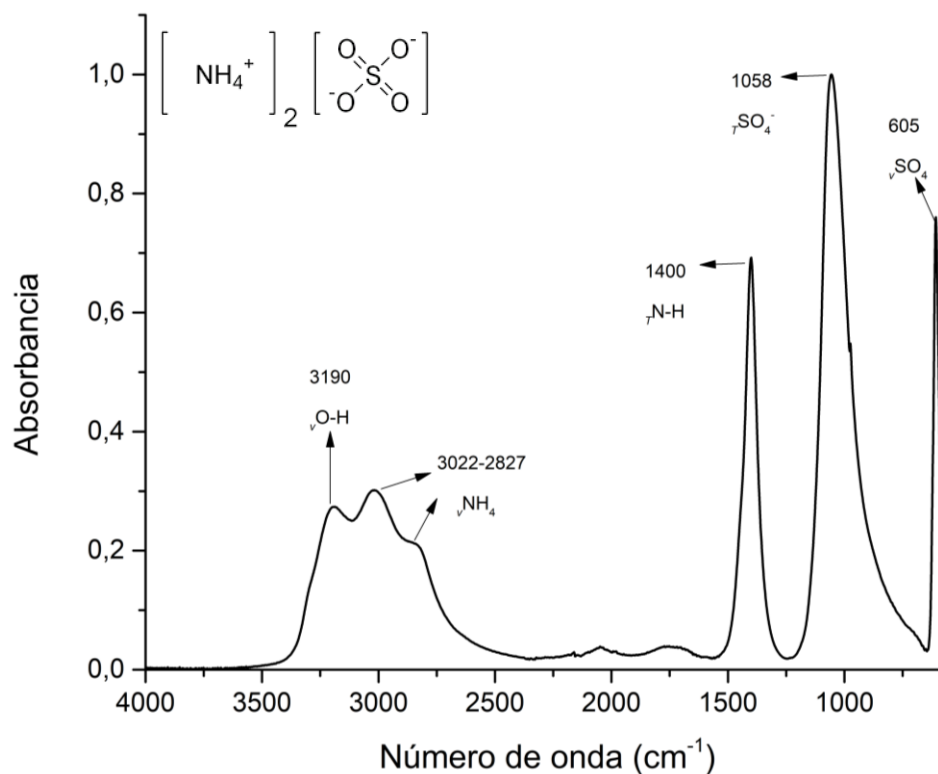


Figura 34. Espectro ATR-FTIR del Sulfato de amonio. (Fuente: Autor)

Por último pero no menos importante, se observaron las bandas a 1058 y 605 cm^{-1} la cual confirma la anterior banda ya que es característica del balanceo del sulfato en la muestra (Agourrame et al., 2023).

Tabla 23. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del Sulfato de amonio. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
3190	Estiramiento O-H
3022-2827	Estiramientos NH_4^+
1400	Tensión N-H
1058	Tensión SO_4^{2-}
605	Balanceo SO_4^{2-}

CLORURO DE AMONIO

Las bandas presentes en el espectro de la Figura 36, demuestran la presencia del catión amonio presente en esta sal, que se preparó con el fin de analizar Ácido clorhídrico que es usado en la fase final para la obtención del clorhidrato de cocaína, y la preparación en forma

de sal de amonio permite al laboratorio de la Fiscalía identificar mediante ATR-FTIR esta sustancia sin involucrar el cristal del accesorio de ATR.

Tal como se mencionó con anterioridad, las bandas concernientes con el catión amonio se presentaron, de manera similar al Sulfato de amonio en la región de 3118 cm^{-1} y 3022 cm^{-1} que corresponden, tal como lo describe la Tabla 24, a los estiramientos de los enlaces del NH_4^+ , todo según la interpretación del espectro del cloruro de amonio puro en investigaciones del 2024 (Chamorro et al., 2024). Luego se observaron bandas en 2000 cm^{-1} y 1756 cm^{-1} que representan la flexión de la red cristalina del cloruro de amonio (Kuzmenko et al., 2014; Pajarito et al., 2019)

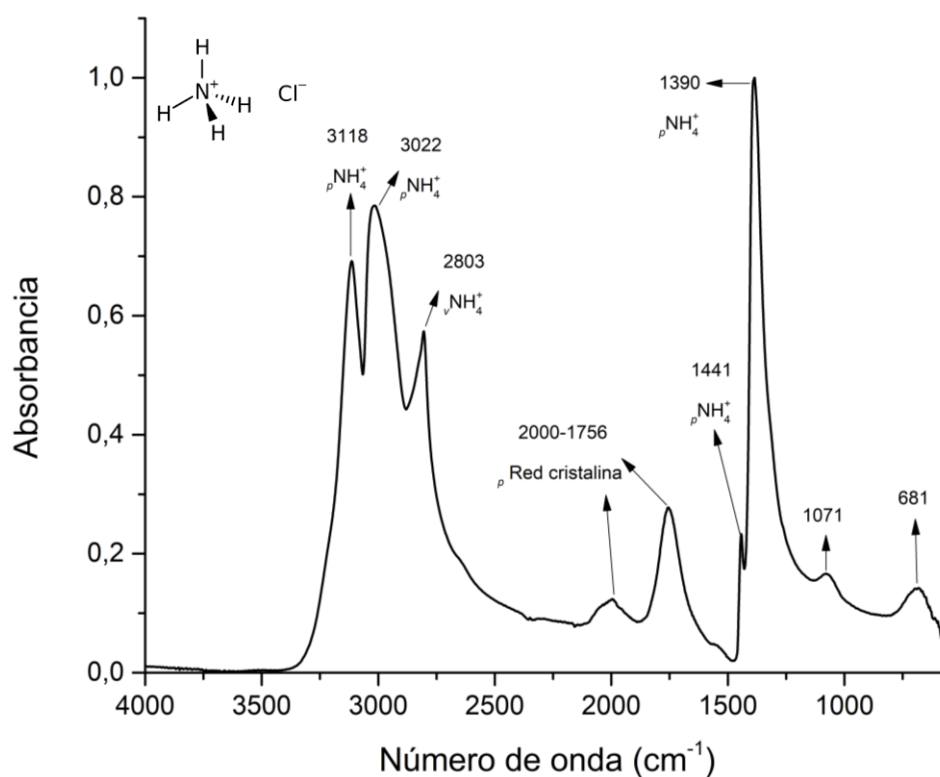


Figura 35. Espectro ATR-FTIR del Cloruro de amonio. (Fuente: Autor)

Partiendo de los resultados obtenidos en la investigación de Max y Chapados se pudo interpretar que las bandas en 1441 cm^{-1} y 1390 cm^{-1} son significativas al momento de identificar la presencia o ausencia del amonio en una muestra, estas son indicativas del balanceo y estiramiento en tal catión, lo mismo reporta González y colaboradores, donde según su interpretación del espectro, indica que la banda de alrededor 1448 cm^{-1} es asociada al ion NH_4 (González-Rodríguez et al., 2018), así mismo especifican que las

bandas presentes en la región de 1000 y 650 cm^{-1} indican la liberación de agua en la muestra (Max & Chapados, 2013).

Tabla 24. Asignaciones del espectro ATR-FTIR del cloruro de amonio. (Fuente: Autor)

Número de onda (cm^{-1})	Asignación
3118-3022	Estiramientos NH_4^+
2803	Balanceo NH_4^+
2000-1756	Flexión de la red cristalina
1441-1390	Tensión N-H
1000-650	Liberación del agua

4.3. ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO EN MUESTRAS DE CEMENTO, THINNER Y GASOLINA

Tal como se describió en la sección de metodología, el cemento, el thinner y la gasolina son sustancias comerciales que, dentro del marco legal, tienen usos en los campos de la construcción, el transporte, la agricultura y la industria. Estas sustancias que forman parte de la lista de sustancias controladas, por el hecho de que son usualmente utilizadas en las fases de la extracción de cocaína de las hojas de coca, tienen distribución comercial a nivel nacional y presentan distintos tipos y marcas de las mismas. Con el objetivo de diferenciar las sustancias, basado en los datos espectrales de las mediciones ATR-FTIR, se realizó un análisis multivariado con PCA y análisis de conglomerados, para determinar si existe una diferencia entre los tipos de muestras de las sustancias en cuestión.

CEMENTO

El cemento, indispensable en la construcción, presenta tres tipos: Cemento de uso general, cemento blanco y cemento estructural, cada uno de ellos, contiene una serie de compuestos químicos, como silicatos, sulfatos, carbonatos entre otros, que según la información que proporciona Chipatecua, estos se presentan como óxidos, tal como lo reporta la Tabla 25.

Tabla 25. Compuestos químicos del cemento (CHIPATECUA, 2022).

Nombre	Fórmula Química	Abreviatura
Silicato tricálcico	3CaO-SiO_2	C_3S
Silicato dicálcico	2CaO-SiO_2	C_2S
Aluminato tricálcico	$2\text{CaO-Al}_2\text{O}_3$	C_3A
Ferroaluminato tetracálcico	$4\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$	C_4AF

En cuanto a los cementos obtenidos de sitios comerciales, se encuentran entre los de uso general las siguientes marcas: Argos, Tequendama, CEMEX y Holcim, para el caso de los de tipo estructural se encuentran: Holcim y CEMEX; por último, para el tipo de cemento blanco se contaron con muestras de Argos y CEMEX (Anexo 4).

Basado en el hecho de que el cemento como se presenta en distintos tipos y marcas a nivel nacional, se realizaron los análisis ATR-FTIR por quintuplicado para realizar un PCA y análisis clúster, con la finalidad de poder definir si existe una diferencia que permita discriminar las muestras con la información espectral en los cementos de estudio.

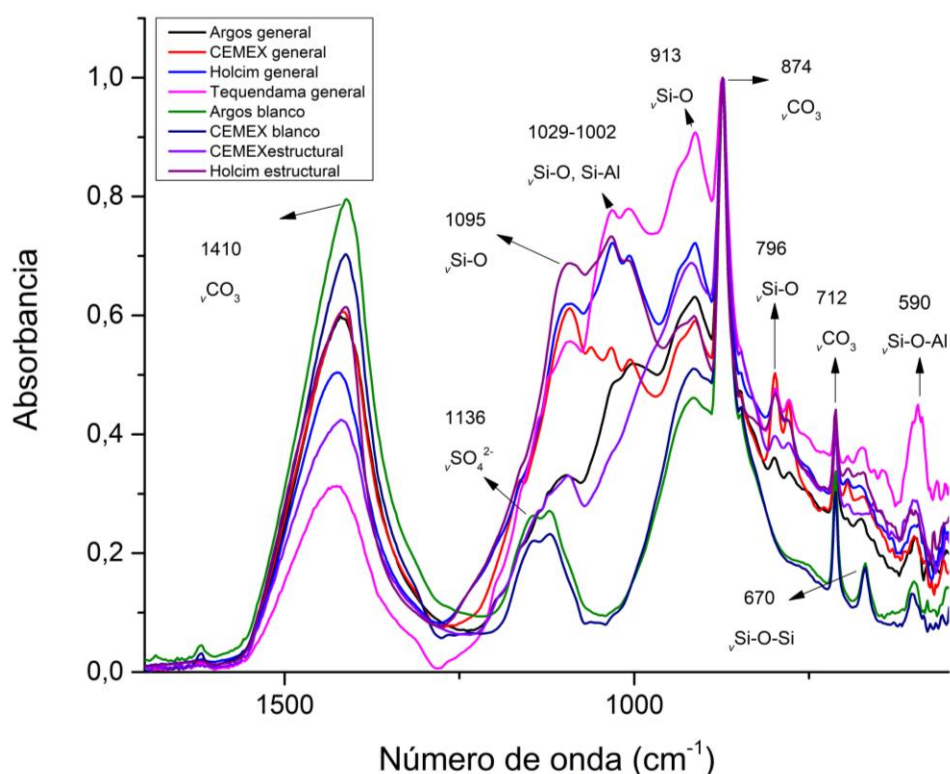


Figura 36. Espectro ATR-FTIR de cementos. (Fuente: Autor)

Tal como se aprecia en la Figura 36, se mostraron las bandas del espectro desde su región de huella dactilar, eso se debe a que a partir de dicha región (1700 cm^{-1}) no se presentaron bandas características del cemento, caso que comúnmente está asociado con la presencia de humedad y formación de Ca(OH)_2 en las muestras aproximadamente en la región de 3600 cm^{-1} (Horgnies et al., 2013), muestra de ello se refleja en los espectros incluidos en el

anexo 4. En primer lugar, se pudieron identificar los enlaces asociados a los silicatos y aluminosilicatos presentes en la estructura del cemento. Según la literatura, las bandas de absorción presentadas para los carbonatos que también se presentan en las muestras, y que son la base principal para el proceso con la hoja de coca, se presentaron en 1410, 874 y 712 cm^{-1} respectivamente, así mismo se confirmó con la literatura asociada con la cuantificación de carbonato de calcio en cementos y esta afirma nuevamente la presencia de estas bandas en los espectros de cemento (Piqué & Vázquez, 2012) (Kalkreuth et al., 2024), teniendo en cuenta que las dos primeras bandas mencionadas presentan una alta intensidad en el espectro, también se pudo inferir que los cementos blancos de CEMEX y Argos presentaron las mayores intensidades en la banda de 1410 cm^{-1} ; de la misma manera se observaron bandas asociadas con los silicatos presentes en forma de dióxido y trióxido de silicato, tal como lo describe Horgnies en su estudio de cementos mediante espectrometría infrarroja, allí se identificaron bandas características de vibraciones asimétricas de los enlaces Si-O de las fases del SiO_2 presentes en la muestra, las bandas relacionadas con dichos enlaces se encuentran en 1095, 1029, 913 y 796 cm^{-1} (Horgnies et al., 2013; Tararushkin et al., 2020).

En cuanto a las bandas alrededor de 1136 cm^{-1} se compararon con las presentadas en el trabajo de Kalkreuth y colaboradores donde la banda de la vibración asimétrica del SO_4 la cual se presentó en este estudio alrededor de 1136 cm^{-1} . Aparte de los grupos mencionados anteriormente, se tuvo en cuenta que en los cementos contienen aluminosilicatos presentes, y estos presentaron bandas de absorción cerca de 1002 y 593 cm^{-1} las cuales indican los estiramientos de Al-O y Si-O-Al, que son indicativas del aluminato tricálcico del cemento (Vega et al., 2022).

Con el PCA aplicado a la información espectral de las muestras de cemento, tomando su región entre 1700 cm^{-1} hasta 550 cm^{-1} , donde se encontró que entre las dos primeras componentes principales explican el 60,9 % de la varianza.

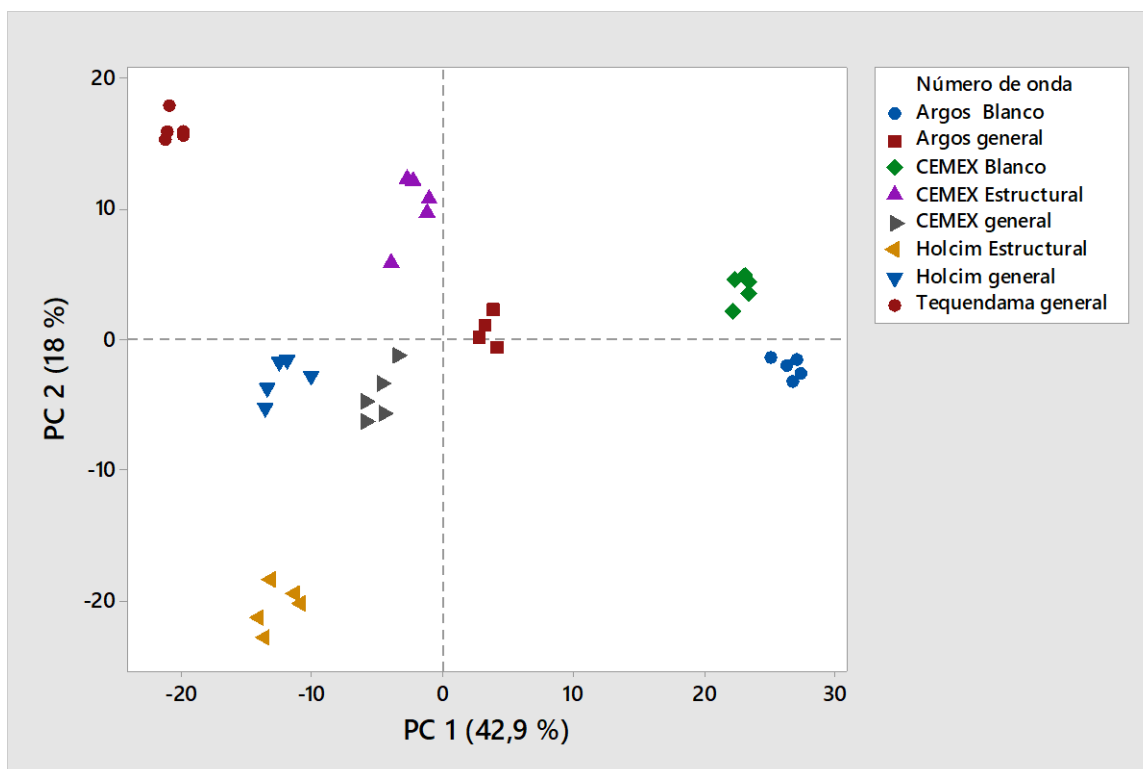


Figura 37. Análisis de Componentes Principales (PCA) de cementos con información espectral de la primera derivada. (Fuente: Autor)

En cuanto a la Figura 37 de PCA, se encontró la distribución de las muestras de cemento, donde la muestra de Tequendama se sitúa en la región superior izquierda, aislada de las demás muestras, así mismo se encontró que las muestras de cementos blancos de marca Argos y CEMEX también se situaron en la parte derecha de la gráfica, pero con una separación de los mismos debido a que son de distinta marca, y sus espectros varían principalmente en la intensidad de las bandas principales de sus grupos funcionales, de los cuales se puede evidenciar que el que se muestra con amplia diferencia respecto a los demás tipos de cemento es el grupo sulfato alrededor de 1136 cm^{-1} donde presenta una intensidad baja y se presenta una definición marcada de la banda. Por otra parte los cementos, CEMEX general, Holcim estructural y general, se ubicaron en la parte inferior derecha de la gráfica (región de la PC1), tal agrupación se debe a la similitud de las bandas de absorción de cada muestra, por ello la muestra de CEMEX estructural se separa un poco de tal grupo ya que se esperaba que tuviera cierta similitud con Holcim estructural, pero gracias a la ausencia de la banda alrededor de 1029 cm^{-1} que se asoció con enlaces Al-O de los aluminosilicatos; esta muestra de tipo estructural más bien tuvo una cercanía con Argos de uso general, y esto pudo estar basado en la intensidad idéntica en la banda de

carbonatos de 1410 cm^{-1} y la de los estiramientos asimétricos de Si-O de las dos muestras; otro factor que puede explicar esta separación de las puntuaciones, son las diferencias en la intensidad de las bandas de carbonatos y silicatos entre las muestras de tipo estructural.

Así como en el PCA, el dendrograma de la Figura 38 muestra el agrupamiento de las muestras de cemento basado en su información espectral de orden cero, si bien se realizó PCA con la primera derivada, los conglomerados de observaciones presentan las mismas características en los clúster generados. Allí se pudo evidenciar la presencia de cuatro grupos principales, donde las muestras de cemento Tequendama se presentaron en un único grupo, así como las muestras de cemento blanco de las dos marcas que se analizaron.

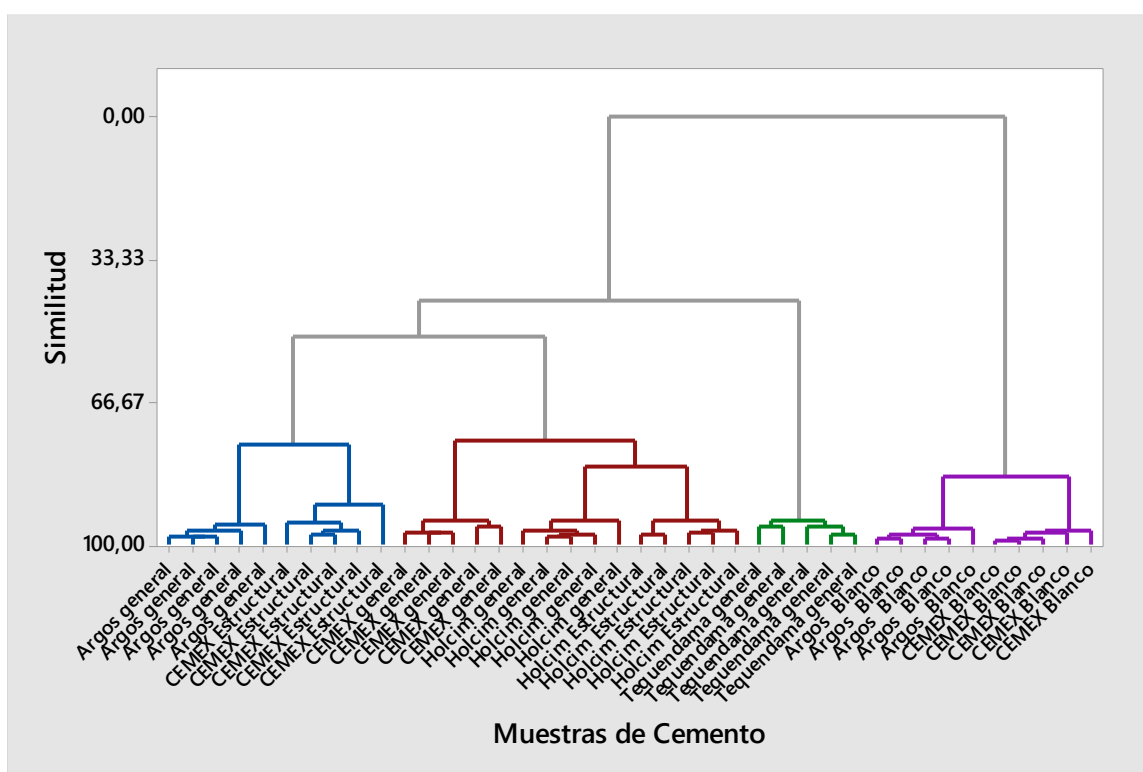


Figura 38. Dendrograma para muestras de cemento con información espectral de primer orden. (Fuente: Autor)

Se pudo evidenciar que lo indicado con anterioridad tiene fiabilidad, esto argumentado en los cuatro conglomerados presentes en el dendrograma, donde el primer conglomerado está conformado por las muestras de Argos general y Cemex estructural, presentando una similitud del 76,30 %, así mismo, en el segundo conglomerado presentó una similitud del

75,58 % para las muestras de CEMEX general, Holcim general y estructural, lo cual está sustentado en las similitudes de su información espectral en cuanto a las bandas de absorción de enlaces relacionados con las fracciones de carbonatos y silicatos de las muestras.

Por otra parte, el tercer conglomerado se presentó para las muestras de cemento Tequendama de uso general, presentando un porcentaje de similitud entre muestras del 94,18 %, la razón de esta separación total de las demás muestras se debe a su variación de intensidad en el espectro, donde para la banda de 1410 cm^{-1} fue la que presentó menor intensidad, a diferencia de las bandas asociadas a los silicatos y aluminosilicatos donde fue la de mayor intensidad de estas bandas.

Por último se presentó el agrupamiento de las muestras de cemento blanco de CEMEX y Argos, donde concuerda con la distribución de las puntuaciones de dichas muestras en el PCA, atribuido a las intensidades de la banda de carbonato y la presencia de la banda de sulfatos alrededor de 1136 cm^{-1} , esto se debe a la presencia de impurezas en las materias primas usadas durante su fabricación, teniendo en cuenta que son marcas distintas de cemento, se presentó una similitud de 84,07 % la cual a diferencia de las demás fue un porcentaje alto, teniendo en cuenta las distintas marcas.

De acuerdo con lo evidenciado en los análisis quimiométricos aplicados a las muestras de cemento dispuestas en la investigación, se puede afirmar que, es necesario añadir a la base de datos espectrales de referencia los espectros ATR-FTIR de los cementos de estudio, lo cual ayudará a diferenciar entre incautaciones el tipo de cemento usado en la fabricación de cocaína y en futuras investigaciones, permitirá el perfilamiento de las formas de fabricación de cocaína partiendo del tipo de insumos usados en sus distintas fases de preparación.

GASOLINA PARA MOTOR

Partiendo del hecho, de que la gasolina es uno de los primeros y principales insumos involucrados en la síntesis de cocaína, se procedió a realizar análisis con herramientas quimiométricas para determinar si existen diferencias entre los dos tipos de gasolina (gasolina corriente y gasolina extra), basado en el hecho de que el origen de la gasolina a nivel nacional está en manos de Ecopetrol SA. Se tomaron muestras de Bucaramanga y el punto de distribución de Pamplona para verificar diferencias.

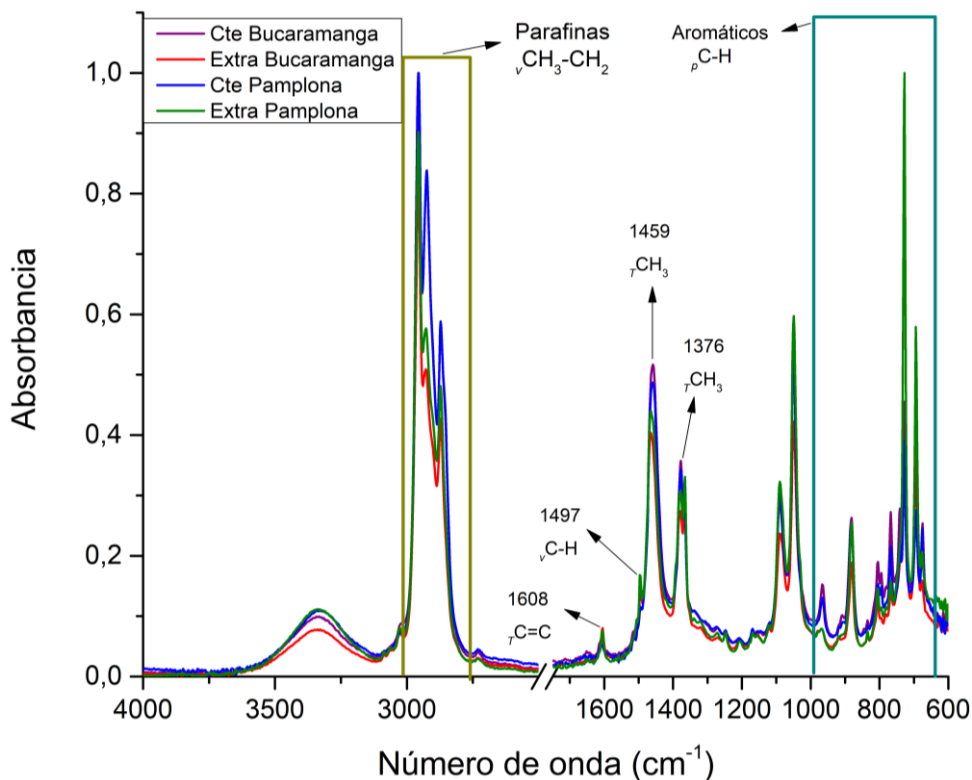


Figura 39. Espectro ATR-FTIR de muestras de gasolina. (Fuente: Autor)

En el espectro de las muestras de Gasolina de la Figura 39, se encontraron bandas como las de la región entre 2970 cm^{-1} y 2850 cm^{-1} la cual según Obeidat, estas corresponden a las vibraciones de estiramiento simétrico y asimétrico del enlace C-H de los grupos CH_3 y CH_2 presentes en las cadenas carbonadas de la gasolina (Obeidat et al., 2022); así mismo se identificó otro grupo de bandas que se sitúan por debajo de 1000 cm^{-1} hasta 670 cm^{-1} las cuales tienen las asignaciones de balanceo fuera del plano de los enlaces C-H de compuestos aromáticos presentes generalmente en las gasolinas que como bien se aprecia en la Figura 39, hay una amplia diferencia de intensidades entre los espectros de gasolina corriente y extra, siendo esta última la que presenta mayores intensidades, tales diferencias se notan en los espectros de cada muestra en el anexo 5. Las bandas de entre la región de 1200 cm^{-1} – 1000 cm^{-1} se asignaron, según lo encontrado en la literatura a la vibración de estiramiento de enlaces O-H (Lalbiaktluanga et al., 2024), que si bien se notó, delante de 3000 cm^{-1} se presentó también una banda de amplia frecuencia, confirmando la presencia posible de agua en la gasolina.

Ya en la región de 1497 cm^{-1} se observó una banda de baja intensidad que representa el estiramiento C-C de anillos aromáticos, también las bandas más pronunciadas de 1459 cm^{-1} – 1376 cm^{-1} fueron asignadas en estudios del 2022 a la flexión simétrica y asimétrica del grupo metilo de las cadenas alifáticas (Khanmohammadi Khorrami et al., 2022).

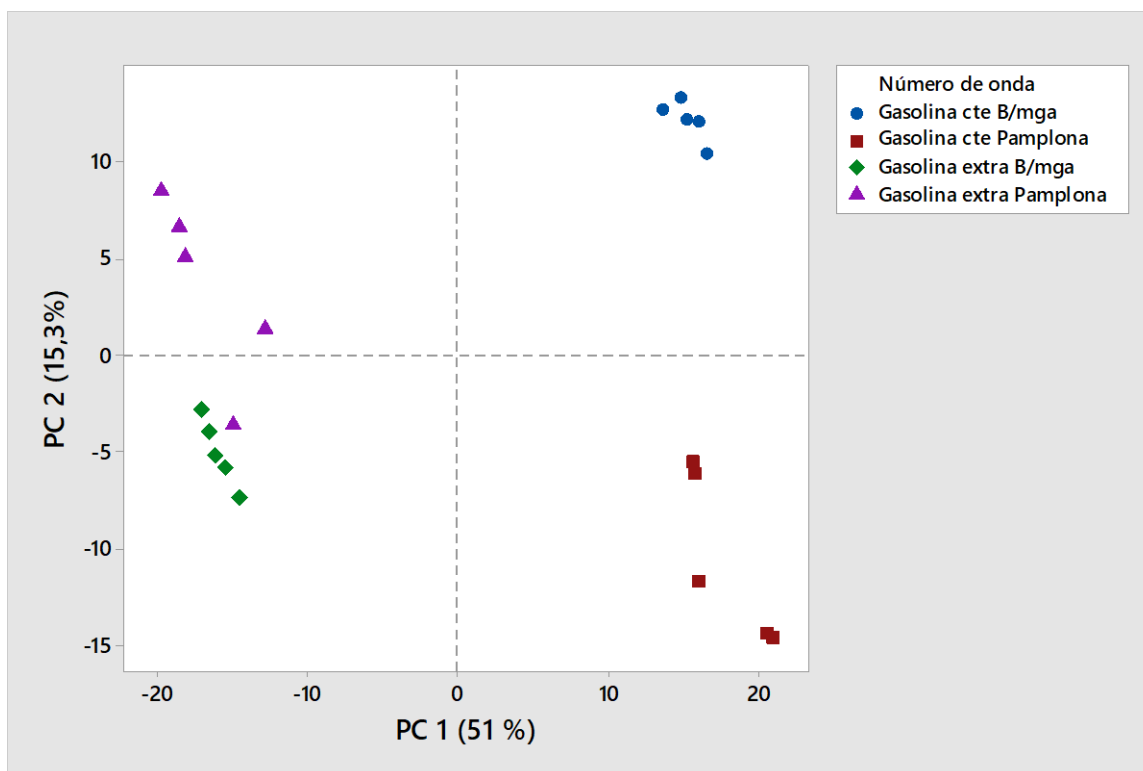


Figura 40. Análisis de Componentes Principales (PCA) en muestras de Gasolina con la información espectral de la primera derivada. (Fuente: Autor)

Basado en el hecho de la alta similitud de los espectros ATR-FTIR de las gasolinas, se aplicó el PCA con el objetivo de observar una separación de los tipos de gasolinas, teniendo en cuenta que, como el PCA tiene variabilidad bajo factores como intensidad de las bandas, cosa que se mostró en la Figura 40 donde con la suma de las dos primeras componentes principales da un total del 66,3 % de la varianza total de los datos, allí se observó una distribución de las muestras en dos grupos generales, donde en la región izquierda se agruparon las muestras de gasolinas extras de Bucaramanga y Pamplona y en la parte derecha se situaron las gasolinas corrientes de los mismos puntos, esta discriminación de las muestras está sustentada en las diferencias en términos de intensidad de las bandas presentes en los espectros, principalmente se observan mayores intensidades en las muestras de gasolina corriente en la región cerca de 3000 cm^{-1} y las bandas concernientes

con las flexiones y estiramiento de los enlaces CH_3 . Por otra parte, para las muestras de gasolina extra de los dos puntos de muestreo, se observaron mayores intensidades en las bandas relacionadas con anillos aromáticos; de lo anteriormente mencionado, también se suma que el agrupamiento de las muestras se asemeja en el análisis jerárquico de conglomerados tal como se observa en la Figura 41.

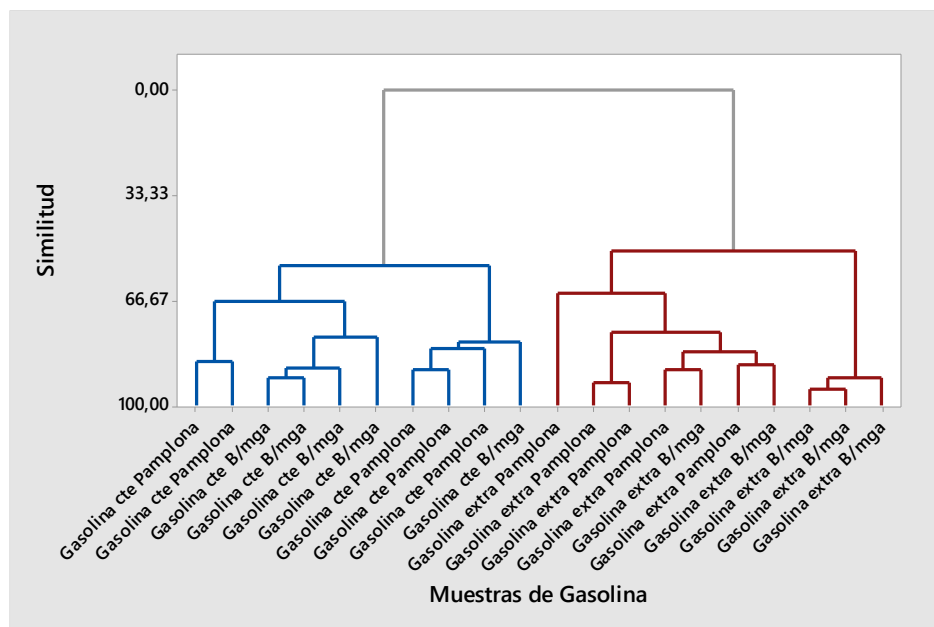


Figura 41. Dendrograma del primer orden en gasolinas. (Fuente: Autor)

Del análisis de clúster se observaron dos conglomerados, uno con las agrupaciones de las muestras de gasolina corriente de Pamplona y Bucaramanga, donde presenta una similitud del 55,47 %, en la parte derecha de color rojo se observó el conglomerado 2, conformado por las muestras de gasolina extra de Pamplona y Bucaramanga, este tuvo similitud en el porcentaje de similitud, presentando un 51,03 %.

Finalmente se decidió, bajo los resultados obtenidos con las herramientas multivariantes, que a la base de datos se agregarán los espectros ATR-FTIR de gasolina extra y corriente por separado, mas no se agregarán respecto al punto de muestreo, lo anterior teniendo en cuenta que las diferencias observadas, están basadas en la intensidad de ciertas bandas, que si bien permiten diferenciar la gasolina extra de la corriente, esto está asociado con la diferencia de octanaje de las gasolinas, teniendo la gasolina corriente un promedio de 87 octanos (Renting, 2023), a diferencia de la gasolina extra que puede contener entre 95 y 98 octanos en la clase premium (Terán et al., 2023).

THINNER

También conocido como diluyente, disolvente o adelgazador de pinturas, el thinner se compone de una mezcla de disolventes orgánicos, que como informaron en 2023, se puede contar con la presencia de Tolueno, benceno, xileno, etanol y acetatos dentro de su formulación (Thakur et al., 2023), estas varían dependiendo del uso, tipo de pintura a diluir y empresa productora.

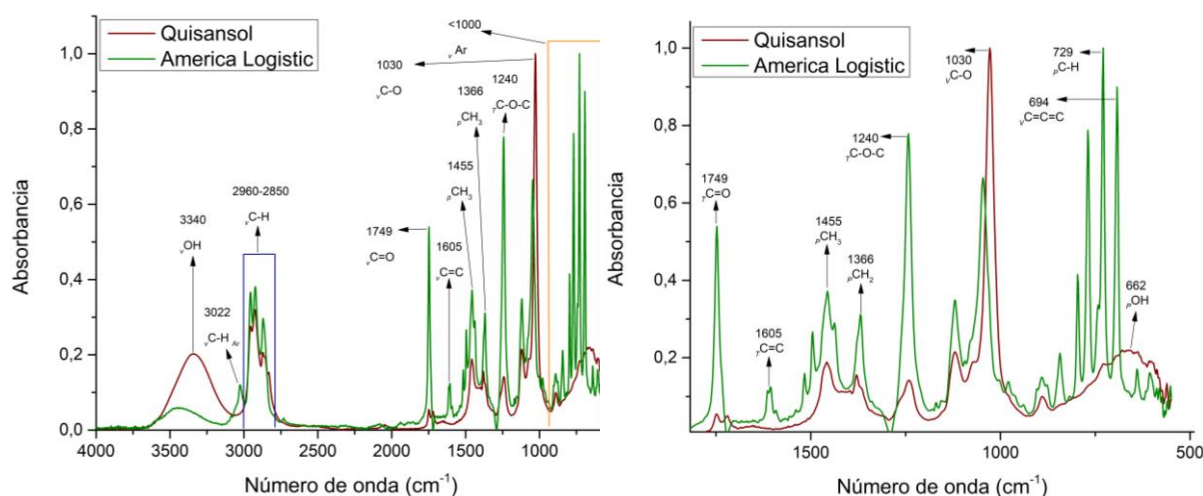


Figura 42. Espectro ATR-FTIR de las muestras de thinner. (Fuente: Autor)

En la Figura 42 se lograron diferenciar claramente los dos tipos de Thinner obtenidos para la investigación, para la muestra de Quisansol se presentó un espectro con ausencia de bandas relacionadas con enlaces del anillo aromático, en su lugar, se presentaron bandas en la región de cadenas alifáticas con una menor intensidad en el espectro de la marca Quisansol.

Aparte de las bandas mencionadas, se presentaron las que se asocian con las vibraciones del enlace C-H de anillos aromáticos en la región de 3022 cm^{-1} , esta banda se confirma con la presencia de la banda de absorción de 1605 cm^{-1} que se asoció con la tensión C=C (Yin et al., 2019) y así mismo en la región con número de onda menor a 1000 cm^{-1} se presentan las bandas de balanceo fuera del plano de aromáticos presentes básicamente en la muestra de America Logistic, esto teniendo en cuenta que presentó similitud con el espectro de gasolina, donde para tal región también hubo presencia de bandas asociadas con

fracciones de conjuntos aromáticos en 729 cm^{-1} y 694 cm^{-1} asignadas a las vibraciones correspondientes a balanceo y estiramiento de enlaces entre C-H y C=C (Obeidat et al., 2022), para el caso del espectro de la marca Quisansol, predominó la banda de 1030 cm^{-1} y teniendo en cuenta que también presenta una banda de baja intensidad en la región de 1750 cm^{-1} se puede inferir que en conjunto con las bandas de 1236 cm^{-1} y 1030 cm^{-1} se confirma la presencia de acetatos (Adil et al., 2023), que comúnmente son usados dentro de las formulaciones del thinner, así mismo se observó que también se presentan dichas bandas para la marca de Cúcuta.

Según lo observado con las banda asignada a enlaces O-H en 3340 cm^{-1} y 662 cm^{-1} , se evidenció mayor presencia de alcohol en el thinner de Bucaramanga, así mismo se observa una mayor incidencia de acetatos en la misma, a diferencia de la muestra de Cúcuta que presenta mayormente bandas relacionadas con grupos aromáticos.

Para concluir, las muestras, evidenciaron notoriamente la separación en base a sus bandas características entre muestras, basado principalmente por la ausencia de bandas características de los anillos aromáticos en el thinner Quisansol, así como la diferencia de intensidades en bandas como las de los enlace O-H y del grupo carbonilo especialmente. De acuerdo con lo mencionado anteriormente, las muestras de thinner no requirieron análisis quimiométrico, que si bien se observa en el espectro ATR-FTIR de los mismos, hay una diferencia notable entre las marcas estudiadas. Con base en lo anterior, se agregarán los espectros de las marcas Quisansol y America Logistic a la base de datos para diferenciar los thinner en futuras incautaciones, e identificar puntos de distribución de dichos productos para fines ilícitos.

4.4. ANÁLISIS DE REPITIBILIDAD Y REPRODUCIBILIDAD

La variabilidad de los espectros ATR-FTIR se evaluó, tal como se especifica en la sección 3.7, con los valores del área bajo la curva de una o más bandas presentes en el espectro de cada sustancia, lo anterior utilizando el software Matlab para la obtención del área bajo la curva para cada repetición realizada por los analistas involucrados.

El análisis R&R, teniendo los datos obtenidos de las áreas de cada sustancia, todo en una matriz de Excel, se tomaron los datos, se llevaron a Minitab 18 y se realizó el análisis Gage R&R por el método ANOVA, los resultados obtenidos se encuentran a continuación:

Tabla 26. Tabla ANOVA de dos factores con interacción. (Fuente: Autor)

Fuente	GL	SC	MC	F	P
SUSTANCIA	25	915023	36600,9	287,413	0,0000027
ANALISTA	1	123	123,1	0,967	0,335735
SUSTANCIA * ANALISTA	25	3184	127,3	7,456	0,00041
Repetibilidad	104	1776	17,1		
Total	155	920106			

Donde:

GL: grados de libertad

SC: suma de los cuadrados

F: Valor F

P: Valor P

Según los datos obtenidos en la Tabla 26, donde destacan los valores F del análisis, debido a que el factor SUSTANCIA (sustancias analizadas) brindaron una gran contribución a la variación del estudio, esto basado en el alto valor del estadístico F, que en cuanto mayor sea su valor, mayor será su contribución a la variabilidad (Castañeda Hernández et al., 2021), esto sumado al valor $P < 0.05 \%$, indicando que permite rechazar la hipótesis nula y aceptar la hipótesis alternativa, que estaría indicando que la diferencia en los valores de área bajo la curva de las sustancias analizadas estadísticamente sería significativa.

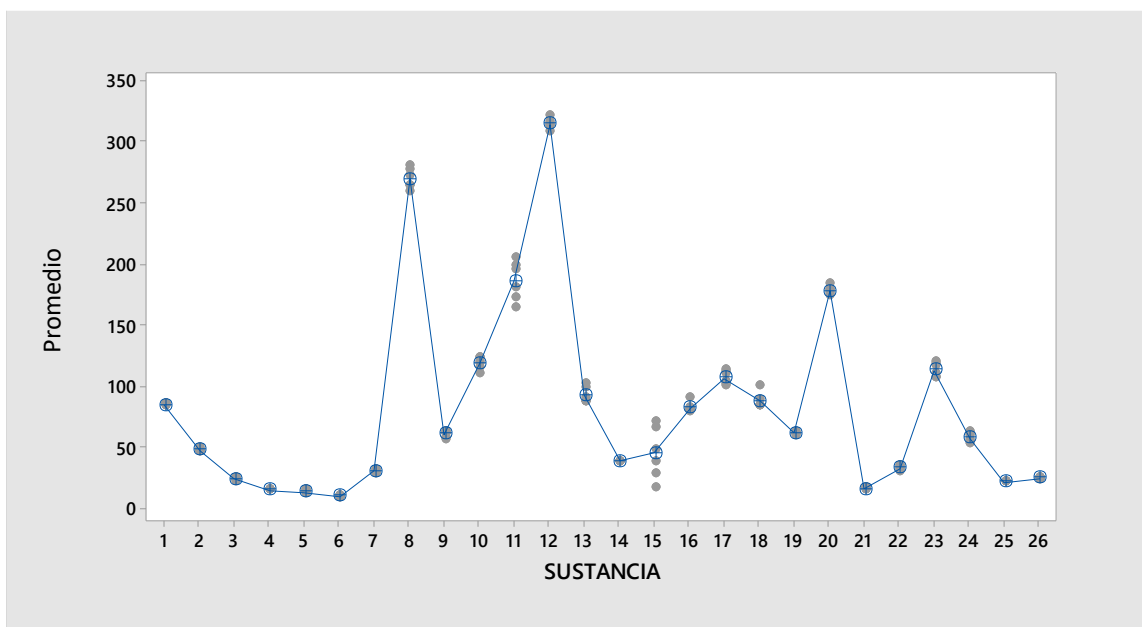


Figura 43. Gráfica de variación en la totalidad de repeticiones de cada sustancia. (Fuente: Autor)

Con el fin de soportar gráficamente lo mencionado, el programa generó la gráfica de la Figura 43, donde de manera más visual, se aprecia la dispersión de los datos de las áreas bajo la curva para cada sustancia analizada, donde se pudo inferir que la sustancia 11 (butanol) y 15 (cloruro de calcio) presentaron una mayor dispersión general de los datos, esto pudo estar asociado con el tamaño de partícula en el caso del cloruro de calcio, lo cual influye en la calidad del espectro (Jimare Benito et al., 2008); en cuanto al butanol, la baja precisión de las medidas para este estudio pudo tener influencia por la intensidad individual de cada espectro.

La misma tendencia se encuentra en la interacción SUSTANCIA * ANALISTA donde el valor P , que es notoriamente menor a 0.05, lo que indica, junto a su valor F , que contribuye en menor medida a la variación total. Para una comprensión más visual, se generó la gráfica de interacción SUSTANCIA - ANALISTA de la Figura 44 donde se observan los promedios de cada sustancia para cada analista, donde como se contrasta con las dispersiones observadas en la Figura 43, las sustancias de Butanol y Cloruro de calcio presentan mayor diferencia entre los analistas, mientras que la sustancias 8 (cloruro de amonio), 13 (butanol), 17 (gasolina) y 18 (hexano), presentaron una diferencia menos marcada entre los promedios de las áreas calculadas para las repeticiones de los analistas; partiendo de lo mencionado, se puede deducir que el sistema es competente para determinar variaciones de los espectros ATR-FTIR de las sustancias controladas, y que las demás sustancias presentaron un mejor comportamiento en cuanto a la similitud de los promedios para cada analista.

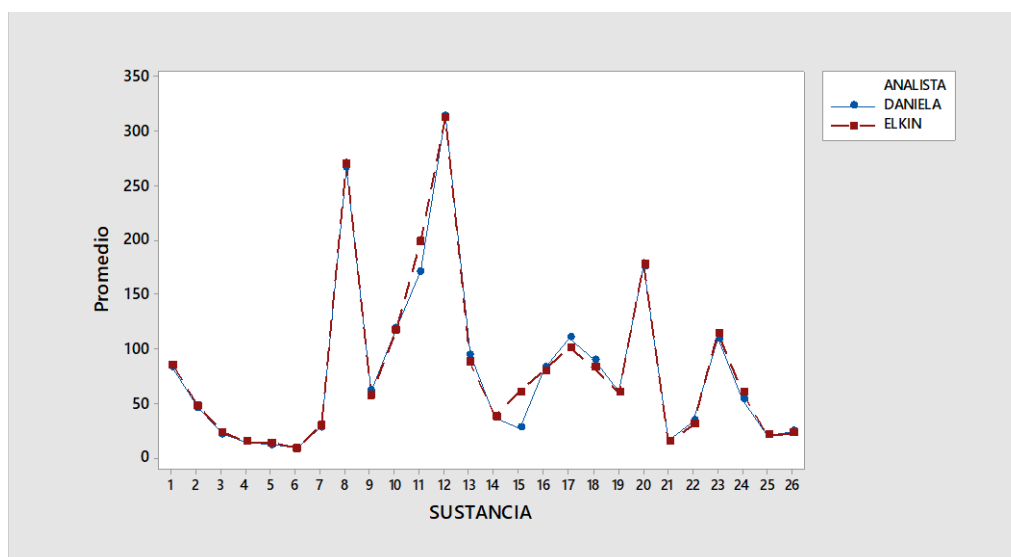


Figura 44. Interacción del valor promedio para cada sustancia por cada analista. (Fuente: Autor)

Lo anteriormente dicho sobre la contribución a la variabilidad, se puede apreciar en la Figura 45, donde el componente parte a parte, que representa las sustancias medidas y analizadas en el estudio, representan gran porcentaje de la variación total del sistema de medición, en cuanto a los porcentajes de contribución de la repetibilidad y reproducibilidad son poco significativos, indicando que estos criterios de evaluación son aceptables con las áreas halladas en los espectros ATR-FTIR (Minitab, 2024).

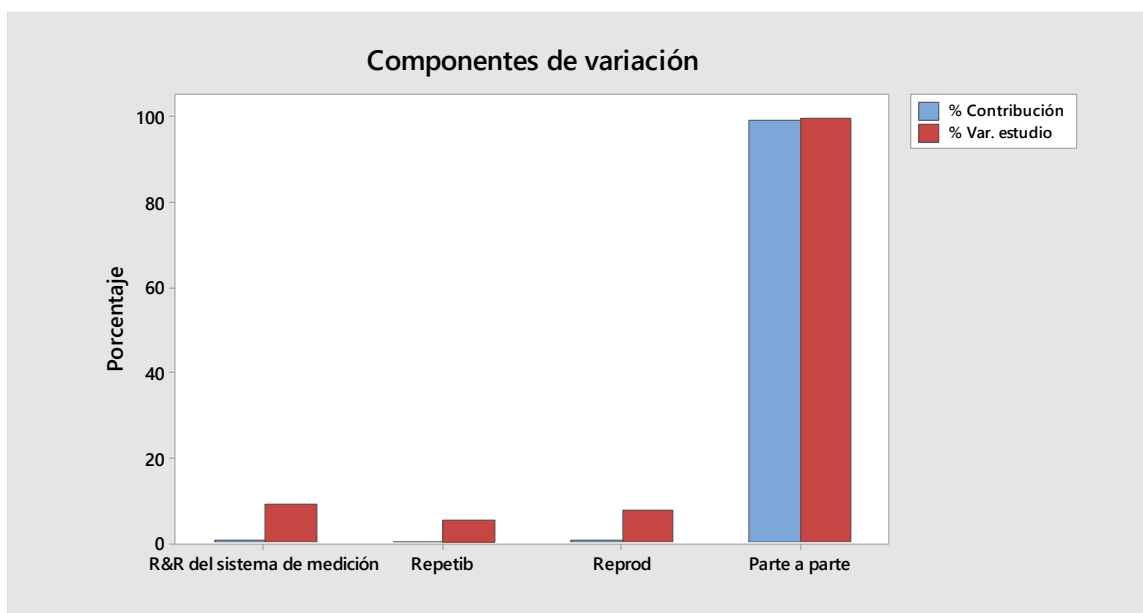


Figura 45. Gráfica de componentes de variación. (Fuente: Autor)

Otro factor a destacar en el análisis R&R, son los porcentajes de contribución a la variación del estudio, que como se aprecia en la Tabla 27, se notó claramente que la variación del estudio estuvo notablemente relacionado con los valores parte a parte, que hacen referencia a las áreas halladas en los espectros de cada sustancia controlada, este presentó un porcentaje de contribución de 99,12 % de la variación total, esto se fundamenta bajo el hecho de que para cada sustancia se tomaron distintos rangos para la determinación de las áreas, teniendo en cuenta que todas las sustancias presentan distintas bandas de absorción.

Tabla 27. Componentes de la varianza. (Fuente: Autor)

Fuente	Comparación de la Varianza	%Contribución a la Varianza
Gage R&R total	53,84	0,88
Repetibilidad	17,08	0,28
Reproducibilidad	36,76	0,60
ANALISTA	0,00	0,00
ANALISTA*SUSTANCIA	36,76	0,60
Parte a parte	6078,93	99,12
Variación total	6132,77	100,00

Sumado a lo anterior, se puede resaltar que, la repetibilidad es la representación de la variación o el error representativo de las áreas de los espectros medidos repetidamente por un analista y para este parámetro de variación el valor de 0,28 % no fue representativo para la contribución a la varianza; en el caso de la reproducibilidad, con un porcentaje del 0,60 % representa un mínimo aumento de contribución a la varianza total del sistema respecto a la repetibilidad, esto se debe a que en la reproducibilidad se evaluó la inconsistencia de las mediciones ATR-FTIR aplicadas a las sustancias respecto a los dos analistas, lo que claramente atribuye en la variación de las medidas. La representación del bajo porcentaje de contribución a la varianza se evidencia en la Figura 46 que muestra la interacción analista-medida, que en este análisis es el área de las bandas.

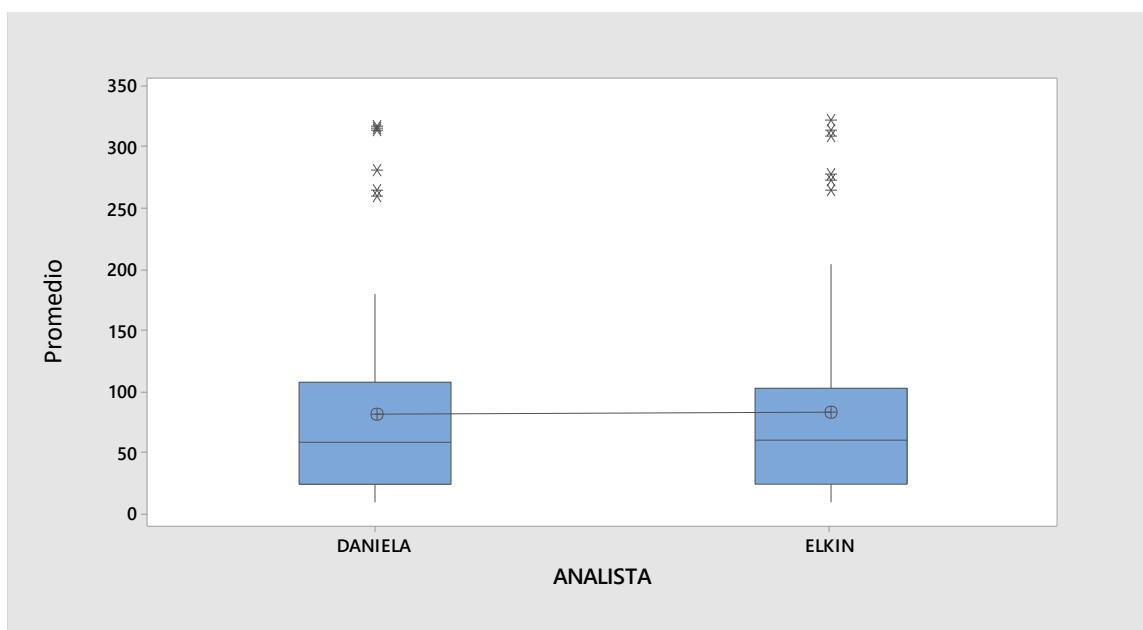


Figura 46. Interacción de la medida (área) por cada Analista. (Fuente: Autor)

Según la gráfica de interacción analista-medida, se pudo observar que las medidas de áreas de los dos analistas no tienen una variabilidad significativa, confirmando así, que las dispersiones de las medidas observadas en la Figura 43 no son suficientemente significativas para contribuir a la varianza total.

Tabla 28. Evaluación del sistema de medición. (Fuente: Autor)

Fuente	Desviación Estándar. (DE)	Var. Estudio (6 ×DE)	%Var. Estudio (%VE)
Gage R&R total	7,3373	44,024	9,37
Repetibilidad	4,1329	24,797	5,28
Reproducibilidad	6,0626	36,376	7,74
ANALISTA	0,0000	0,000	0,00
ANALISTA*SUSTANCIA	6,0626	36,376	7,74
Parte a parte	77,9675	467,805	99,56
Variación total	78,3120	469,872	100,00

Por último y más importante, a partir de la información de la Tabla 28 donde el valor del porcentaje de variación del estudio para el sistema de medición que es ATR-FTIR, presentó un valor Gage R&R total de 9,37 %, valor que comparado con los criterios de aceptación establecidos por el AIAG (Automotive Industry Action Group), donde indica que si el porcentaje de variación del sistema de medición es menor al 10 %, es aceptable (Fernández et al., 2014), lo que indica que el análisis R&R para el sistema de medición usado para la identificación de sustancias controladas, que en esta investigación fue ATR-FTIR, es repetible y reproducible; que si bien, hubieron variaciones en algunas medidas, no fueron significativas para el análisis, dando fiabilidad de las mismas.

CONCLUSIONES

En relación con los objetivos planteados al inicio de la investigación, se puede concluir que se dio cumplimiento a cada uno de los mismos, ya que se logró dar el perfil químico a cada una de las sustancias controladas facilitadas por la Fiscalía, todo basado en la información espectral que proporcionó cada sustancia en relación a los tipos de enlaces y grupos funcionales presentes en cada sustancia.

Así mismo se pudieron diferenciar y discriminar las sustancias químicas controladas que son de origen comercial, todo gracias a las herramientas multivariantes aplicadas a la información espectral de primer orden y primera derivada, donde los PCA explicaron entre el 60 y 67 % de la varianza en las muestras de cemento y gasolina.

También se pudo determinar mediante el análisis R&R que la variabilidad de los datos, al realizar cambio en términos de analista, no presenta valores significativos en las medidas espectrales ya que el porcentaje total del estudio fue inferior a los márgenes de aceptación (10%), confirmando así la precisión en términos de repetibilidad y reproducibilidad del método analítico en la investigación.

Es importante resaltar la relevancia de la base de datos espectrales de referencia que fue creada para el laboratorio de la Fiscalía General de la Nación, dado que, con dicha información, se permitirá de manera eficiente y confiable, la identificación mediante ATR-FTIR de las sustancias controladas producto de incautaciones. Además, con tal información se tendrá la ventaja de realizar análisis rápidos, cosa que es indispensable en los laboratorios de química de dicha institución.

RECOMENDACIONES

Por último, se recomienda nutrir la base de datos espectrales con las sustancias controladas que no pudieron ser analizadas por cuestiones de disponibilidad del material, del mismo modo se sugiere ampliar la gama de productos comerciales tales como cemento y thinner, teniendo en cuenta la extensa gama de marcas que se presentan a nivel nacional.

BIBLIOGRAFÍA

- Adil, M., Giri, B. R., Elkhazraji, A., & Farooq, A. (2023). Mid-IR absorption spectra of C1-C4 alkyl acetates at high temperatures. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 300, 108522. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2023.108522>
- Aduanas, S. N. de. (2022, diciembre 1). *Aduanas, PDI y Fiscalía realizan incautación histórica: 690 toneladas de químicos para la producción de cocaína*. aduana. <http://www.aduana.cl/aduanas-pdi-y-fiscalia-realizan-incautacion-historica-690-toneladas-de/aduana/2022-12-01/093435.html>
- Agourrame, H., Khachani, N., & Diouri, A. (2023). Elaboration of Fluorapatite—Reinhardbraunsite mixtures using ammonium sulfate activated electric arc furnace slag. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.07.208>
- Almaraz Vega, E. (2015). *Diseño, construcción y validación de un reactor de plasma a presión atmosférica para tratamiento de líquidos*. <https://riudg.udg.mx//handle/20.500.12104/79850>
- Armada de Colombia. (2023, junio 7). *Incautados insumos para el procesamiento de sustancias ilícitas | Armada Nacional*. <https://www.armada.mil.co/es/content/incautados-insumos-para-procesamiento-sustancias-ilicitas-0>
- Armada de Colombia. (2024, junio 28). *Incautados insumos que serían utilizados para el procesamiento de sustancias ilícitas | Comando General de las Fuerzas Militares de Colombia*. <https://www.cgfm.mil.co/es/multimedia/noticias/incautados-insumos-que-serian-utilizados-para-el-procesamiento-de-sustancias>
- Belhadj-Tahar, H., & Sadeg, N. (2005). Methcathinone: A new postindustrial drug. *Forensic Science International*, 153(1), 99–101. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2005.04.023>

- Class, L.-C., Kuhnen, G., Rohn, S., & Kuballa, J. (2021). Diving Deep into the Data: A Review of Deep Learning Approaches and Potential Applications in Foodomics. *Foods*, 10(8), Article 8. <https://doi.org/10.3390/foods10081803>
- Consejo Nacional de Estupefacientes. (2015). *Resolución número 0001 de 2015, por la cual se unifica y actualiza la normatividad sobre el control de sustancias y productos químicos*. vLex. <https://vlex.com.co/vid/resolucion-numero-0001-2015-554650074>
- Contreras, L. G. M., & Arbelaez, M. B. (2007). ESTUDIO DE REPETIBILIDAD Y REPRODUCIBILIDAD UTILIZANDO EL MÉTODO DE PROMEDIOS Y RANGOS PARA EL ASEGURAMIENTO DE LA CALIDAD DE LOS RESULTADOS DE CALIBRACIÓN DE ACUERDO CON LA NORMA TÉCNICA NTCISO/ IEC 17025. *Scientia et Technica*, 1(35), Article 35. <https://revistas.utp.edu.co/index.php/revistaciencia/article/view/5479>
- Cunningham, J. K., Liu, L.-M., & Callaghan, R. C. (2013). Essential (“Precursor”) chemical control for heroin: Impact of acetic anhydride regulation on US heroin availability. *Drug and Alcohol Dependence*, 133(2), 520–528. <https://doi.org/10.1016/j.drugalcdep.2013.07.014>
- Deconinck, E., Duchateau, C., Balcaen, M., Gremeaux, L., & Courselle, P. (2022). Chemometrics and infrared spectroscopy – A winning team for the analysis of illicit drug products. *Reviews in Analytical Chemistry*, 41(1), 228–255. <https://doi.org/10.1515/revac-2022-0046>
- Departamento de Sustancias Químicas Controladas. (2015). *De precursores y cocaína*. <https://biblioteca.digital.gob.cl/items/06759b09-d872-4bb1-8609-f9ab944d18cd>
- Dirección Química Legal y División Cromatografía gaseosa. (2015). *Caracterización química de drogas cocaínicas,—Miscelaneas42799.pdf*. <https://www.pensamientopenal.com.ar/libraries/pdf.js/web/viewer.html?file=https%3>

A%2F%2Fwww.pensamientopenal.com.ar%2Fsystem%2Ffiles%2F2016%2F01%2Fmiscelaneas42799.pdf

- Djordjevic, N., Vlahović, M., Mihajlović, S., Martinovic, S., Vusovic, N., & Lozanović, J. (2022). Fourier-transform infrared spectroscopy analysis of mechanochemical transformation kinetics of sodium carbonate to bicarbonate. *Science of Sintering*, 54, 481–494. <https://doi.org/10.2298/SOS2204481D>
- Dolores, T. N. M., Elizabeth, B. C. L., Alejandrina, G. P., & Dolores, P. Z. (2012). *Introducción a la experimentación en química física y química analítica*. Editorial UNED.
- Du, Y., Hua, Z., Liu, C., Lv, R., Jia, W., & Su, M. (2023). ATR-FTIR combined with machine learning for the fast non-targeted screening of new psychoactive substances. *Forensic Science International*, 349, 111761. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2023.111761>
- Espíndola, H. L. (2023). *Evaluación de riesgos químicos para Gendarmes que realizan pericias con precursores químicos, en el laboratorio de Criminalística de Neuquén Capital*.
- Faraguna, F., Racar, M., & Jukić, A. (2019). Test method for determination of different biodiesels (fatty acid alkyl esters) content in diesel fuel using FTIR-ATR. *Renewable Energy*, 133, 1231–1235. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.09.010>
- Farmer, V. C. (Ed.). (1974). *The Infrared Spectra of Minerals*. Mineralogical Society of Great Britain and Ireland. <https://doi.org/10.1180/mono-4>
- Fernández, M., Lopetey, A., & Enríquez, M. (2014). Evaluación del sistema de medición en la fabricación de gel de hidróxido de aluminio. *Revista Cubana de Farmacia*, 48, 533–541.
- García Carretero, M. L. (2017). *Análisis del contenido polifenólico en vinos tintos mediante lengua electrónica, FTIR y UV-vis*. <https://uvadoc.uva.es/handle/10324/25968>

- Gilbert, A. S. (2017). IR Spectral Group Frequencies of Organic Compounds. En J. C. Lindon, G. E. Tranter, & D. W. Koppenaal (Eds.), *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry (Third Edition)* (pp. 408–418). Academic Press.
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803224-4.00337-X>
- González, G., & Sánchez-Aguirre, O. A. (2020). *Aplicación de Métodos quimiométricos en la investigación de productos naturales*.
- González-Rodríguez, J., Pepper, K., Baron, M., Mamo, S., & Simons, A. (2018). Production and Analysis of Recycled Ammonium Perrhenate from CMSX-4 superalloys. *Open Chemistry*, 16, 1298–1306. <https://doi.org/10.1515/chem-2018-0136>
- Guillaume, E., & Saragoza, L. (2015, febrero 1). *Application of FTIR analyzers to fire Gases Progress in apparatus and method validation for quantitative analysis*.
- Hachem, M., Mizouni, R., Alawadhi, I. M., & Altamimi, M. J. (2023). Digital forensic intelligence for illicit drug analysis in forensic investigations. *iScience*, 26(10), 108023. <https://doi.org/10.1016/j.isci.2023.108023>
- Hernández Villa, F. I. (2019). *Metodología de espectroscopía infrarroja como apoyo para la determinación de grupos funcionales en hidrocarburos*.
<http://www.ptolomeo.unam.mx:8080/xmlui/handle/132.248.52.100/16811>
- Herrera-Basurto, R., Mercader-Trejo, F., & Martinez, F. (2006, octubre 14). *VALIDACIÓN DEL MÉTODO PARA LA DETERMINACIÓN DE NÚMERO DE ONDA POR FT-IR EN PELÍCULAS DE POLIESTIRENO*.
- Hettiarachchi, E., & Grassian, V. H. (2023). Heterogeneous chemistry of methyl ethyl ketone on mineral oxide surfaces: Impacts of relative humidity and nitrogen dioxide on product formation. *Environmental Science: Atmospheres*, 3(5), 799–815.
<https://doi.org/10.1039/D3EA00023K>

- Horgnies, M., Chen, J., & Bouillon, C. (2013). *Overview of the use of Fourier Transformed Infrared Spectroscopy to study cementitious materials*. 77. <https://doi.org/10.2495/MC130221>
- ÍNaturalistEc. (2023). “*Erythroxylum coca*” en PlantList. www.theplantlist.org. <http://www.theplantlist.org/tpl1.1/record/kew-2801328?ref=tpl1>
- Jackson. (1991). PCA With More Than Two Variables. En *A Use's Guide to Principal Components* (pp. 26–62). John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1002/0471725331.ch2>
- JIFE, L. (2018). *JIFE Junta Internacional de Fiscalización de Estupefacientes*.
- Jimare Benito, M., Bosch-Ojeda, C., & Rojas, F. (2008). Process Analytical Chemistry: Applications of Near Infrared Spectrometry in Environmental and Food Analysis: An Overview. *Applied Spectroscopy Reviews*, 43, 452–484. <https://doi.org/10.1080/05704920802031382>
- John, D. K., dos Santos Souza, K., & Ferrão, M. F. (2023). Overview of cocaine identification by vibrational spectroscopy and chemometrics. *Forensic Science International*, 342, 111540. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2022.111540>
- Joshi, R., Sathasivam, R., Jayapal, P. K., Patel, A. K., Nguyen, B. V., Faqeerzada, M. A., Park, S. U., Lee, S. H., Kim, M. S., Baek, I., & Cho, B.-K. (2022). Comparative Determination of Phenolic Compounds in Arabidopsis thaliana Leaf Powder under Distinct Stress Conditions Using Fourier-Transform Infrared (FT-IR) and Near-Infrared (FT-NIR) Spectroscopy. *Plants*, 11(7), 836. <https://doi.org/10.3390/plants11070836>
- Kadam, S. S., Mesbah, A., van der Windt, E., & Kramer, H. J. M. (2011). Rapid online calibration for ATR-FTIR spectroscopy during batch crystallization of ammonium sulphate in a semi-industrial scale crystallizer. *Chemical Engineering Research and Design*, 89(7), 995–1005. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2010.11.013>

- Kalkreuth, J., Ullrich, A., Garbev, K., Merz, D., Stemmermann, P., & Stapf, D. (2024). Accelerated carbonation of hardened cement paste: Quantification of calcium carbonate via ATR infrared spectroscopy. *Journal of the American Ceramic Society*, 107(4), 2627–2640. <https://doi.org/10.1111/jace.19546>
- Kamiloglu, S. (2019). Authenticity and Traceability in Beverages. *Food Chemistry*, 277, 12–24. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.10.091>
- Karunadasa, K. (2019). Dehydration of Calcium Chloride as Examined by High-temperature X-ray Powder Diffraction. *International Multidisciplinary Research Journal*, 37–43.
- Kassambara, A. (2017). *Practical Guide to Cluster Analysis in R: Unsupervised Machine Learning* (Vol. 1). STHDA.
- Kenneth A. R. (2001). *Análisis instrumental* Kenneth A. Robinson. https://www.academia.edu/44228594/An%C3%A1lisis_instrumental_Kenneth_A_R_robinson
- Khanmohammadi Khorrami, M., Sadrara, M., & Mohammadi, M. (2022). Quality classification of gasoline samples based on their aliphatic to aromatic ratio and analysis of PONA content using genetic algorithm based multivariate techniques and ATR-FTIR spectroscopy. *Infrared Physics & Technology*, 126, 104354. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2022.104354>
- Kimani, M. M., Smith, S. W., Lanzarotta, A., Brueggemeyer, J. L., & Batson, J. S. (2022). Screening suspect pharmaceuticals for illicit designer benzodiazepines using raman, SERS, and FT-IR prior to comprehensive analysis using LC-MS. *Forensic Science International*, 338, 111390. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2022.111390>
- Kınaytürk, N. K., Kalaycı, T., Tunalı, B., & Altuğ, D. T. (2023). A spectroscopic approach to compare the quantum chemical calculations and experimental characteristics of some organic molecules; Benzene, Toluene, P-Xylene, P-Toluidine. *Chemical Physics*, 570, 111905. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2023.111905>

- Kutsyk, A., Ilchenko, O., Pilhun, Y., Nikonova, V., & Obukhovsky, V. (2022). Complex formation in methanol-chloroform solutions: Vibrational spectroscopy and quantum cluster equilibrium study. *Journal of Molecular Liquids*, 367, 120499. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120499>
- Kuzmenko, V., Naboka, O., Gatenholm, P., & Enoksson, P. (2014). Ammonium chloride promoted synthesis of carbon nanofibers from electrospun cellulose acetate. *Carbon*, 67, 694–703. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.10.061>
- LA ROCA CERVIGÓN, MARTÍNEZ DE LEJARZA ESPARDUCER , IGNACIO, MARTÍNEZ VERDU , ROSARIO, MENDEZ MARTÍNEZ , SALVADOR, YAGÜE PERALES , ROSA, & JUAN MARTÍNEZ DE LEJARZA ESPARDUCER. (1999). *ANÁLISIS CLUSTER*. <https://www.uv.es/ceaces/multivari/cluster/CLUSTER2.htm>
- Lalbiaktluanga, Lalramnghaka, J., Lalremruata, B., Lalrempuia, R., & Thanga, H. H. (2024). Detection and estimation of adulterated gasoline fuel in India using FTIR-ATR spectroscopy with chemometric methods. *Infrared Physics & Technology*, 137, 105119. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2024.105119>
- Larkin, P. J. (2018). Chapter 6 - IR and Raman Spectra–Structure Correlations: Characteristic Group Frequencies. En P. J. Larkin (Ed.), *Infrared and Raman Spectroscopy (Second Edition)* (pp. 85–134). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-804162-8.00006-9>
- Lasalle, B. S. I., Pandian, M. S., & Ramasamy, P. (2023). Molecular Interactions Studies on Chloroform in the Environment of o-Cresol: FTIR Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations. *Brazilian Journal of Physics*, 53(4), 97. <https://doi.org/10.1007/s13538-023-01309-6>
- Lavine, B. (2000). *Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry* By Matthias Otto (Freiberg University of Mining and Technology). Wiley-

- VCH: Weinheim. 1999. \$69.95. 307 pp. ISBN 3-527-29628-X. *Journal of the American Chemical Society*, 122(24), 5903–5904. <https://doi.org/10.1021/ja995724t>
- Lavine, B., Almirall, J., Muehlethaler, C., Neumann, C., & Workman, J. (2020). Criteria for comparing infrared spectra – A review of the forensic and analytical chemistry literature. *Forensic Chemistry*, 18, 100224. <https://doi.org/10.1016/j.forc.2020.100224>
- Llamosa, L., Contreras, L., & Botero Arbeláez, M. (2007). Estudio de repetibilidad y reproducibilidad utilizando el método de promedios y rangos para el aseguramiento de la calidad de los resultados de calibración de acuerdo con la norma técnica... *Scientia Et Technica*.
- Ma, Y., Yan, W., Sun, Q., & Liu, X. (2021). Raman and infrared spectroscopic quantification of the carbonate concentration in K₂CO₃ aqueous solutions with water as an internal standard. *Geoscience Frontiers*, 12(2), 1018–1030. <https://doi.org/10.1016/j.gsf.2020.03.002>
- Manjarrés, C. N., Juliana. (2024, marzo 20). *Balance de InSight Crime de incautaciones de cocaína de 2023*. InSight Crime. <http://insightcrime.org/es/noticias/balance-insight-crime-incautaciones-cocaina-2023/>
- Manterola, C., Grande, L., Otzen, T., García, N., Salazar, P., Quiroz, G., Manterola, C., Grande, L., Otzen, T., García, N., Salazar, P., & Quiroz, G. (2018). Confiabilidad, precisión o reproducibilidad de las mediciones. Métodos de valoración, utilidad y aplicaciones en la práctica clínica. *Revista chilena de infectología*, 35(6), 680–688. <https://doi.org/10.4067/S0716-10182018000600680>
- Marcelo, M. C. A., Mariotti, K. C., Ferrão, M. F., & Ortiz, R. S. (2015). Profiling cocaine by ATR–FTIR. *Forensic Science International*, 246, 65–71. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2014.11.011>

- Mata-Miranda, M. M., Guerrero-Robles, C. I., Rojas-López, M., Delgado-Macuil, R. J., González-Díaz, C. A., Sánchez-Monroy, V., Pérez-Ishiwara, D. G., Vázquez-Zapién, G. J., Mata-Miranda, M. M., Guerrero-Robles, C. I., Rojas-López, M., Delgado-Macuil, R. J., González-Díaz, C. A., Sánchez-Monroy, V., Pérez-Ishiwara, D. G., & Vázquez-Zapién, G. J. (2017). Componentes Principales mediante Espectroscopia FTIR como Técnica de Caracterización Innovadora durante la Diferenciación de Células Madre Pluripotentes a Células Pancreáticas. *Revista mexicana de ingeniería biomédica*, 38(1), 225–234. <https://doi.org/10.17488/rmib.38.1.17>
- Max, J.-J., & Chapados, C. (2013). Aqueous ammonia and ammonium chloride hydrates: Principal infrared spectra. *Journal of Molecular Structure*, 1046, 124–135. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2013.04.045>
- Mettler-Toledo International Inc all rights. (2023). *Espectroscopia FTIR*. https://www.mt.com/es/es/home/applications/L1_AutoChem_Applications/ftir-spectroscopy.html
- Miller, J. N., & Miller, J. C. (2010). *Statistics and chemometrics for analytical chemistry* (6th ed). Prentice Hall/Pearson.
- Minitab. (2024). *Interpretar los resultados clave para Estudio R&R cruzado del sistema de medición* [Mtbtopic]. <https://support.minitab.com/es-mx/minitab/help-and-how-to/quality-and-process-improvement/measurement-system-analysis/how-to/gage-study/crossed-gage-r-r-study/interpret-the-results/key-results/>
- Mohamed, M. A., Jaafar, J., Ismail, A. F., Othman, M. H. D., & Rahman, M. A. (2017). Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy. En *Membrane Characterization* (pp. 3–29). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63776-5.00001-2>
- Msimanga, H. Z., Dockery, C. R., & Vandenbos, D. D. (2022). Classification of local diesel fuels and simultaneous prediction of their physicochemical parameters using FTIR-ATR data and chemometrics. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and*

- Biomolecular Spectroscopy*, 279, 121451.
<https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.121451>
- Nespeca, M. G., Hatanaka, R. R., Flumignan, D. L., & Oliveira, J. E. de. (2018). Rapid and Simultaneous Prediction of Eight Diesel Quality Parameters through ATR-FTIR Analysis. *Journal of Analytical Methods in Chemistry*, 2018(1), 1795624.
<https://doi.org/10.1155/2018/1795624>
- Nguyen, A. T., Nguyen, H. C., Nguyen, D. T., Huynh, Q. C., Le, M. H., Huynh, H. T., & Pham, D. T. (2023). Into the synthetic cannabinoid 5-Fluoro-MDMB-PICA in “American grass” illicit drug: Extraction, isolation, structure elucidation, and GC/MS determination. *Talanta Open*, 8, 100246. <https://doi.org/10.1016/j.talo.2023.100246>
- Nicolau, S. T., & Matzger, A. J. (2024). An evaluation of resolution, accuracy, and precision in FT-IR spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 319, 124545. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2024.124545>
- Nimi, C., Yadav, A., Singh, P., Sharma, S., & Singh, R. (2023). Implementing ATR-FTIR spectroscopy and chemometrics for the forensic examination of sexual lubricants and their traces. *Forensic Chemistry*, 36, 100533.
<https://doi.org/10.1016/j.forc.2023.100533>
- Obando Papamija, M. A. (2017). *Fundamentación teórica de la espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier*.
<http://repositorio.unicauca.edu.co:8080/xmlui/handle/123456789/4422>
- Obeidat, S. M., Hammoudeh, A. Y., & Abo-Alfool, N. Q. (2022). Use of Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared Spectroscopy and Principal Component Analysis for the Assessment of Engine Oils. *Journal of Applied Spectroscopy*, 89(1), 118–125. <https://doi.org/10.1007/s10812-022-01334-4>

- Pajarito, B. B., Llorens, C., & Tsuzuki, T. (2019). Effects of ammonium chloride on the yield of carbon nanofiber aerogels derived from cellulose nanofibrils. *Cellulose*, 26(13), 7727–7740. <https://doi.org/10.1007/s10570-019-02645-0>
- Park, K.-B., & Kim, J.-S. (2023). Pyrolysis products from various types of plastics using TG-FTIR at different reaction temperatures. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 171, 105983. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2023.105983>
- Parra, J., & Duffau, B. (2011). *Guía de pericias químicas en el marco de la ley 20.000*. <https://doi.org/10.13140/2.1.2982.5281>
- Pérez-Alfonso, C., Galipienso, N., Garrigues, S., & de la Guardia, M. (2018). Preliminary results on direct quantitative determination of cocaine in impregnated materials by infrared spectroscopy. *Microchemical Journal*, 143, 110–117. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2018.07.026>
- Peta, K., Love, G., & Brown, C. A. (2024). Comparing repeatability and reproducibility of topographic measurement types directly using linear regression analyses of measured heights. *Precision Engineering*. <https://doi.org/10.1016/j.precisioneng.2024.02.009>
- Peter R. Griffiths & James A. de Haseth. (2007). Introduction to Vibrational Spectroscopy. En *Fourier Transform Infrared Spectrometry* (pp. 1–18). John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1002/9780470106310.ch1>
- Piorunska-Sedlak, K., & Stypulkowska, K. (2020). Strategy for identification of new psychoactive substances in illicit samples using attenuated total reflectance infrared spectroscopy. *Forensic Science International*, 312, 110262. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2020.110262>
- Piqué, T. M., & Vázquez, A. (2012). *USO DE ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRANSFORMADA DE FOURIER (FTIR) EN EL ESTUDIO DE LA HIDRATACIÓN DEL CEMENTO*. 3.

- Presidencia de la República. (2024). *La nueva política de drogas de Colombia busca transformar el paradigma hacia la protección de la vida y el medio ambiente*. Presidencia de la República. <https://petro.presidencia.gov.co/prensa/Paginas/La-nueva-politica-de-drogas-de-Colombia-busca-transformar-el-paradigma-hacia-la-proteccion-de-la-vida-y-el-medio-230911.aspx>
- Pretsch, E., Bühlmann, P., & Badertscher, M. (2009). IR Spectroscopy. En *Structure Determination of Organic Compounds: Tables of Spectral Data* (pp. 1–67). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-540-93810-1_7
- Proyecto PRADICAN. (2013, enero 15). *Manual de Sustancias Químicas usadas en... – Comunidad Andina*. <https://www.comunidadandina.org/biblioteca-andinoteca/manual-de-sustancias-quimicas-usadas-en/>
- PubChem. (2024, junio 22). *Cocaine*. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/446220>
- RamírezA, L. M. S. (2017). Reconocimiento Fitoquímico y etnobotánico de *Erythroxylum coca* en la población Nasa del Departamento del Cauca – Colombia. *Criterio Libre Jurídico*, 14(1), Article 1. <https://doi.org/10.18041/1794-7200/criteriojuridico.2017.v14n1.1601>
- Rehman, S., Javaid, S., & Naveed, M. (2022). Polystyrene-Sepiolite Clay Nanocomposites with Enhanced Mechanical and Thermal Properties. *Polymers*, 14, 3576. <https://doi.org/10.3390/polym14173576>
- Renting, C. (2023, septiembre 8). *Conoce los tipos de gasolina y el octanaje de la gasolina en Colombia*. <https://www.rentingcolombia.com/blog/tipos-de-gasolina>
- Rivera B, Diego, Guzmán Alexander, Ramírez Ingrid, Molina V, Daniel, & Poveda Jaramillo, Juan Carlos. (2024). Effect of Si/Al ratio, calcination temperature and post-synthesis phosphorus modification on the textural, structural, acidic, and catalytic properties of amorphous silica-alumina prepared by grafting methods. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*.

- Royer, C., Bernard, S., Beyssac, O., Balan, E., Forni, O., Gauthier, M., Morand, M., Garino, Y., & Rosier, P. (2024). Impact of UV radiation on the Raman and infrared spectral signatures of sulfates, phosphates and carbonates: Implications for Mars exploration. *Icarus*, 410, 115894. <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2023.115894>
- Sauzier, G., Bronswijk, W. van, & Lewis, S. W. (2021). Chemometrics in forensic science: Approaches and applications. *Analyst*, 146(8), 2415–2448. <https://doi.org/10.1039/D1AN00082A>
- Sharma, V., Sarkar, A., Acharya, R., Bagla, H. K., & Pujari, P. K. (2022). Utilization of accelerator and reactor based nuclear analytical techniques for chemical characterization of automobile windshield glass samples and potential of statistical analyses using trace elements towards glass forensics. *Forensic Science International*, 334, 111262. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2022.111262>
- Smith, B. C. (2011). *Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy* (2a ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/b10777>
- Socrates George. (2004). *Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies: Tables and Charts*, 3rd Edition | Wiley. <https://www.wiley.com/en-us/Infrared+and+Raman+Characteristic+Group+Frequencies%3A+Tables+and+Charts%2C+3rd+Edition-p-9780470093078>
- Spiegato. (2021, julio 12). ¿Qué es una base de datos de espectro de infrarrojos? - Spiegato. <https://spiegato.com/es/que-es-una-base-de-datos-de-espectro-de-infrarrojos>
- Tararushkin, E., Shchelokova, T., & Kudryavtseva, V. (2020). A study of strength fluctuations of Portland cement by FTIR spectroscopy. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 919, 022017. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/919/2/022017>

- Téllez Mesa, C. (2019). *Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja en el análisis de alimentos*. <https://idus.us.es/handle/11441/91690>
- Terán, J. C. R., Montalvo, J. S. C., & Contag, P. M. C. (2023). Análisis comparativo de combustibles entre Colombia y Ecuador a partir de la norma INEN 2203 utilizada en la revisión técnica vehicular. *Dominio de las Ciencias*, 9(4), Article 4. <https://doi.org/10.23857/dc.v9i4.3641>
- Thakur, D., Prakash Dubey, N., Arti, Saini, B., & Singh, R. (2023). Pilot study on FT-IR and GC analysis of inhalant substances (thinners and glues) for forensic purpose. *Vibrational Spectroscopy*, 129, 103601. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2023.103601>
- UNODC. (2012). *Recommended Methods for the Identification and Analysis of Cocaine in Seized Materials*. United Nations: Office on Drugs and Crime. [//www.unodc.org/unodc/en/scientists/recommended-methods-for-the-identification-and-analysis-of-cocaine-in-seized-materials.html](http://www.unodc.org/unodc/en/scientists/recommended-methods-for-the-identification-and-analysis-of-cocaine-in-seized-materials.html)
- UNODC. (2023). *Desvío Insumos Químicos*. <https://www.unodc.org/peruandecuador/es/areas/insumos/desvio-insumos-quimicos.html>
- Vargas, J., Botero Arbeláez, M., & Salazar, O. (2007). Método Anova utilizado para realizar el estudio de repetibilidad y reproducibilidad dentro del control de calidad de un sistema de medición. *Scientia Et Technica*, 1.
- Varmuza, K., Penchev, P. N., & Scsibraný, H. (1998). Maximum common substructures of organic compounds exhibiting similar infrared spectra. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 38(3), 420–427. <https://doi.org/10.1021/ci9700889>

- Vega, A., Arévalo-Aranda, C., Zavaleta, S., Juárez, S., Licapa Redolfo, G., Chilicaus, G., & Chávez, D. (2022, enero 1). *Alkaline activation: Cement mortars and recycled brick dust*. <https://doi.org/10.18687/LACCEI2022.1.1.268>
- Vinazco Luz. (2012). *Estudio de Repetibilidad y Reproducibilidad R&R Repeatability and Reproducibility Study of R & R - PDF Descargar libre*. <https://docplayer.es/17041011-Estudio-de-repetibilidad-y-reproducibilidad-r-r-repeatability-and-reproducibility-study-of-r-r.html>
- Wu, Y., Zhang, Q., Zhuo, J., Dong, S., & Yao, Q. (2024). Influence of calcium chloride on the fine particulate matter formation during coal pyrolysis. *Fuel*, 355, 129480. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.129480>
- Xu, M., Wang, C.-H., Terracciano, A. C., Masunov, A. E., & Vasu, S. S. (2020). High accuracy machine learning identification of fentanyl-relevant molecular compound classification via constituent functional group analysis. *Scientific Reports*, 10(1), 13569. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-70471-7>
- Yabagi, J., Mohammed Kimpa, I., Muhammad, M., Rashid, S., Embong, Z., & Agam, M. (2018). The effect of gamma irradiation on chemical, morphology and optical properties of polystyrene nanosphere at various exposure time. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 298, 012004. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/298/1/012004>
- Yi, C., Zhang, Z., Huang, T., & Xiao, H. (2024). Identification of liquor adulteration by Raman spectroscopy method based on ICNAFS. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 312, 124068. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2024.124068>
- Yin, Z., Liu, B., Fan, S., Wang, P., Wang, X., Long, D., Zhang, L., Yang, X., & Li, X. (2019). *In situ* FTIR spectra investigation of the photocatalytic degradation of gaseous

- toluene over a novel hedgehog-like CaFe_2O_4 hollow-structured materials. *Catalysis Communications*, 130, 105754. <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2019.105754>
- Yu, C., Litke, Q., Li, Q., Lu, P., Liu, S., Diony, F., Gong, J., Yang, C., & Liu, S. (2022). Targeted delivery of sodium metabisulfite (SMBS) by pH-sensitive Eudragit L100-55 nanofibrous mats fabricated through advanced coaxial electrospinning. *Journal of Materials Science*, 57(5), 3375–3395. <https://doi.org/10.1007/s10853-021-06785-2>
- Yusoff, M. Z., Chang, K. H., & Abdullah, A. F. L. (2018). Attenuated total reflectance – Fourier transform infra-red spectral profiling of illicit heroin for forensic intelligence. *Australian Journal of Forensic Sciences*, 50(5), 543–551. <https://doi.org/10.1080/00450618.2016.1275794>
- Zhang, X., He, A., Guo, R., Zhao, Y., Yang, L., Morita, S., Xu, Y., Noda, I., & Ozaki, Y. (2022). A new approach to removing interference of moisture from FTIR spectrum. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 265, 120373. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120373>
- Zheng, Y.-Z., Lu, Y.-M., Tian, X.-Y., He, H.-Y., & Zhang, Y.-C. (2022). Combination of FTIR and DFT to study the regulation law of [EMIM][OAc] on the microstructure of the acetone–methanol azeotrope system. *Journal of Molecular Liquids*, 362, 119601. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.119601>

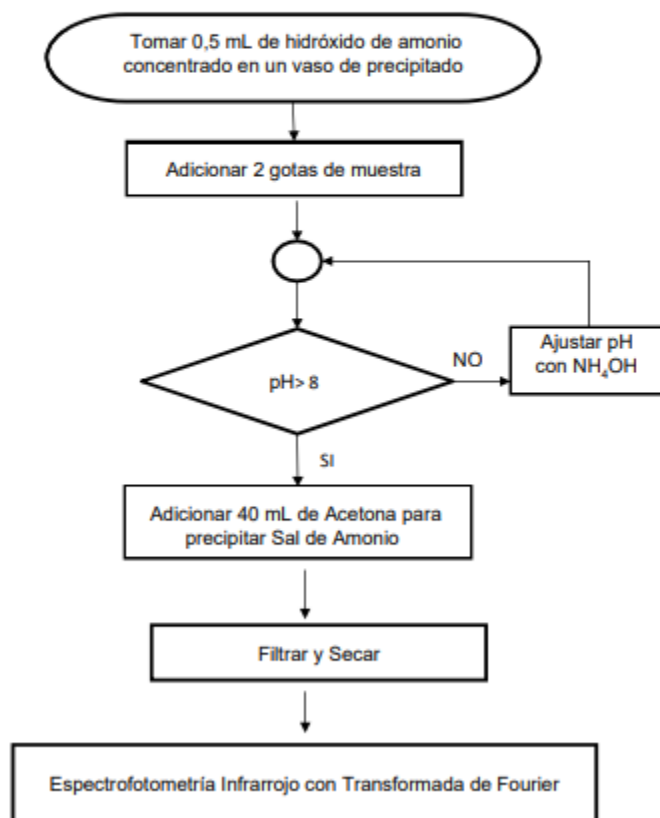
ANEXOS

Anexo 1. Protocolo de análisis de estupefacientes y sustancias controladas.

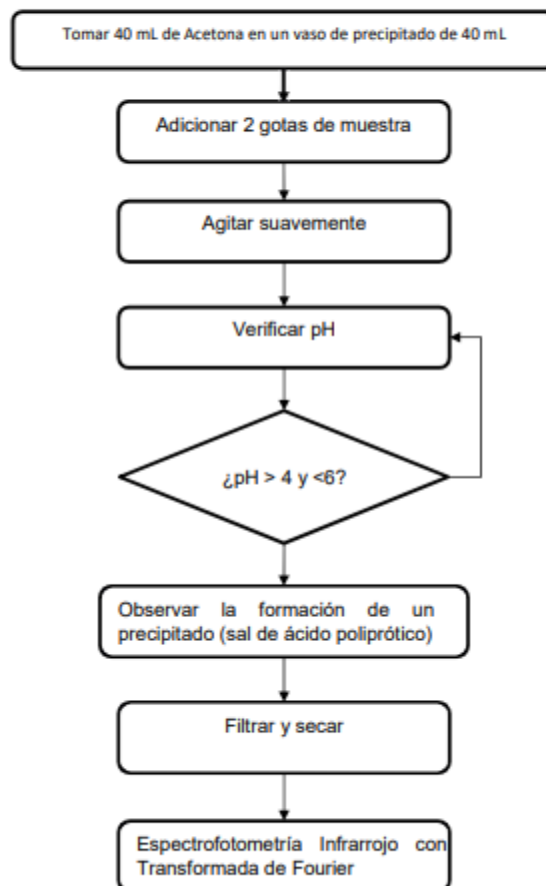
	SUBPROCESO DE CRIMINALÍSTICA	Código: FGN-MS02-14-PR-01
	PROTOCOLO ANÁLISIS DE ESTUPEFACIENTES Y SUSTANCIAS CONTROLADAS	Versión: 05
		Página: 38 de 54

ANEXO 3. ÁCIDOS INORGÁNICOS

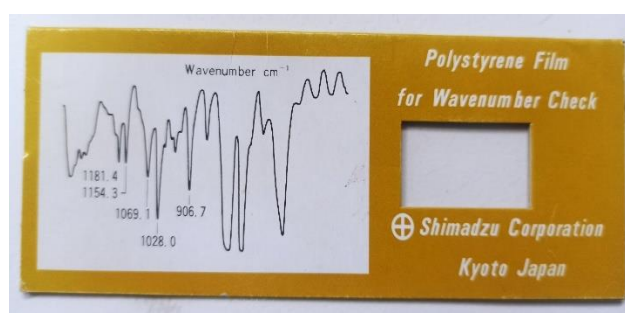
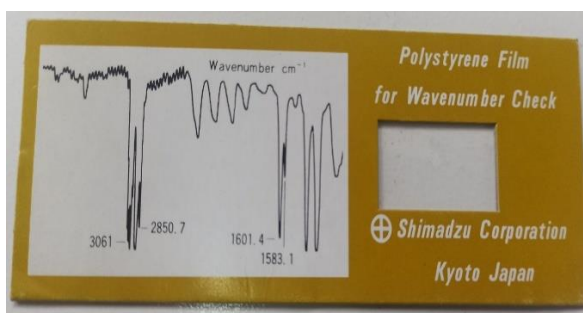
- **Formación de sales de Amonio**



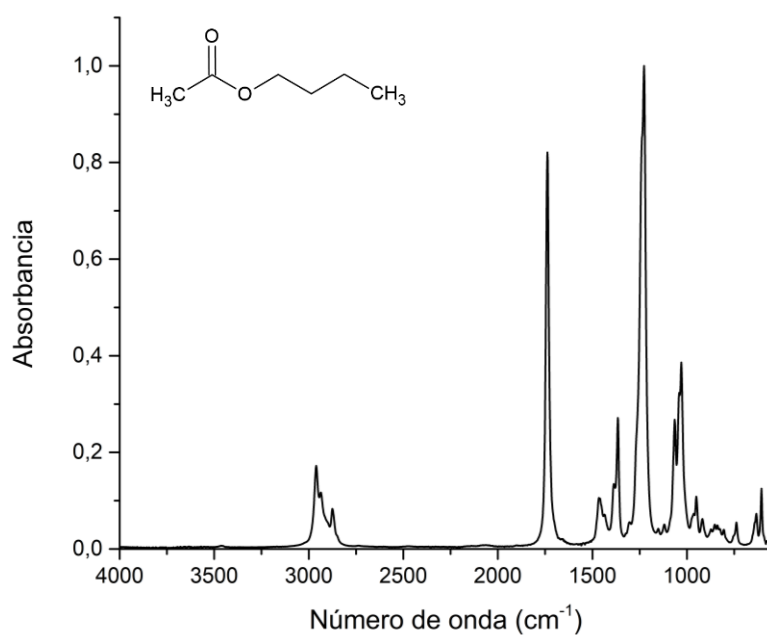
- **Ácidos Polipróticos**



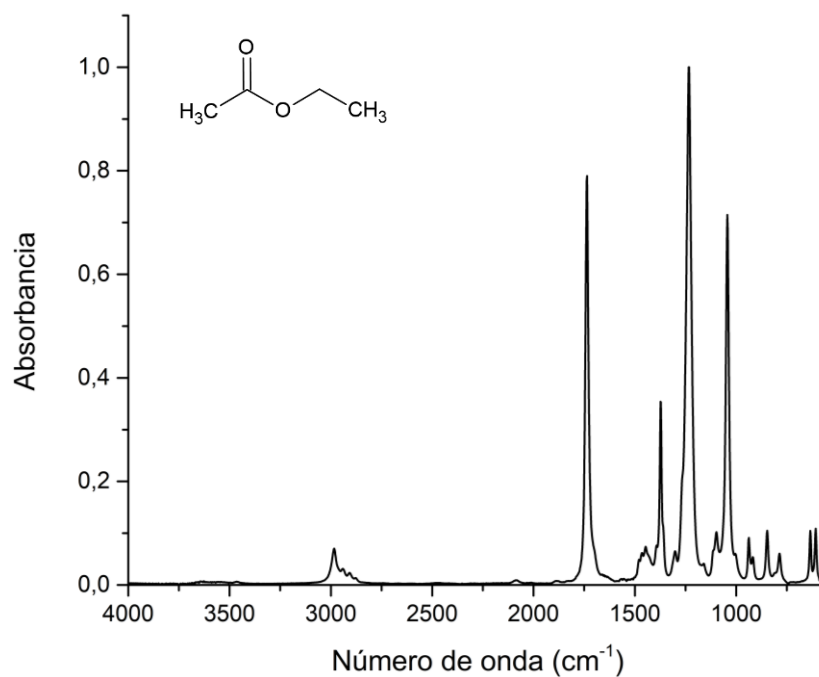
Anexo 2. Película de poliestireno.



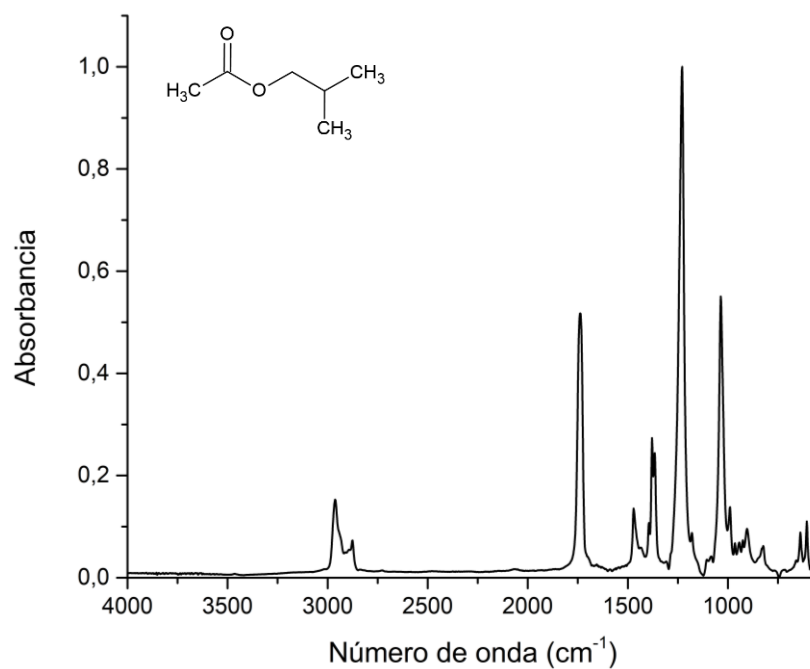
Anexo 3. Espectros ATR-FTIR de acetatos.



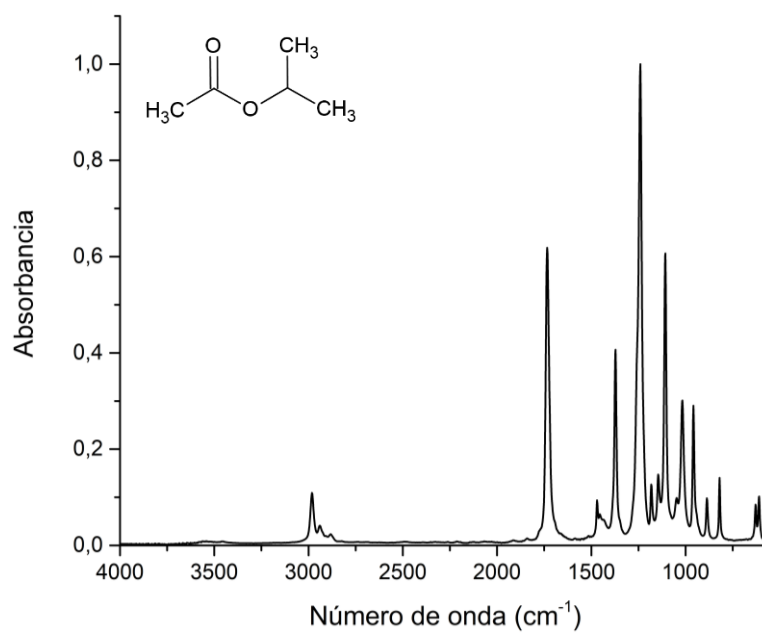
Espectro ATR-FTIR del acetato de butilo.



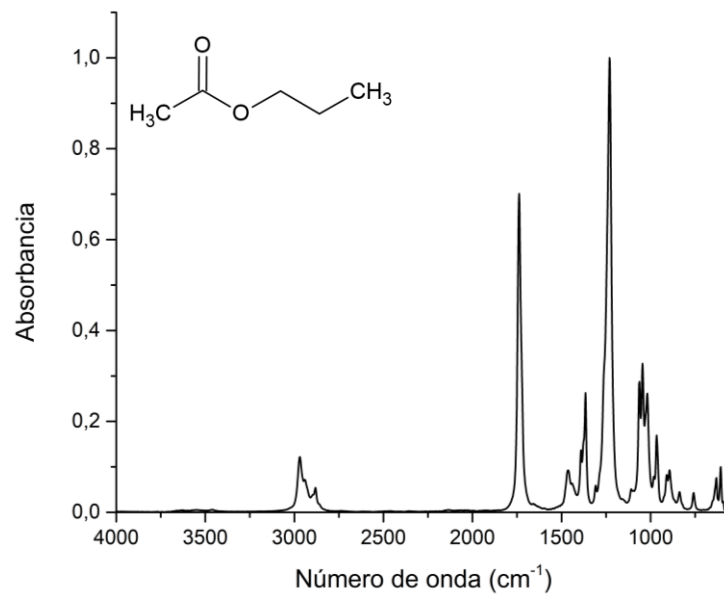
Espectro ATR-FTIR del acetato de etilo.



Espectro ATR-FTIR del acetato de isobutilo.



Espectro ATR-FTIR del acetato de isopropilo.

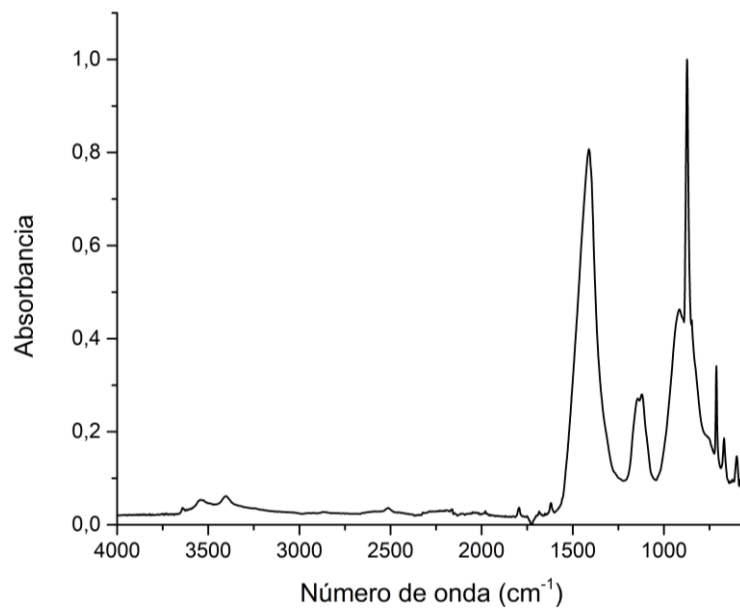


Espectro ATR-FTIR del acetato de n-propilo.

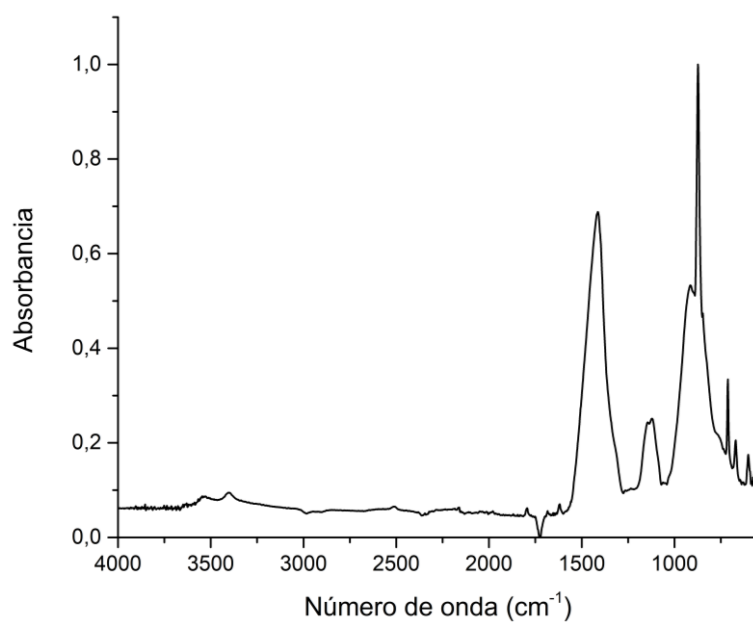
Anexo 4. Muestras de cementos y espectros ATR-FTIR.



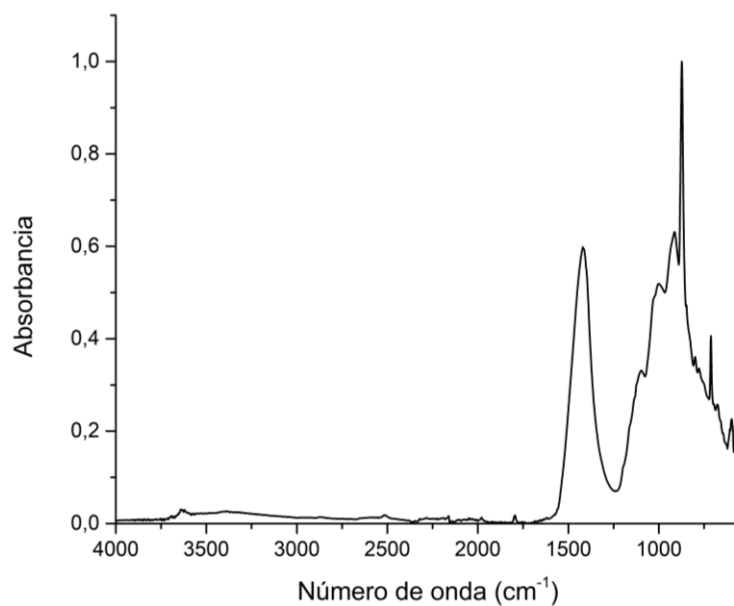
Muestras de Cemento usadas en la investigación. (Fuente: Autor)



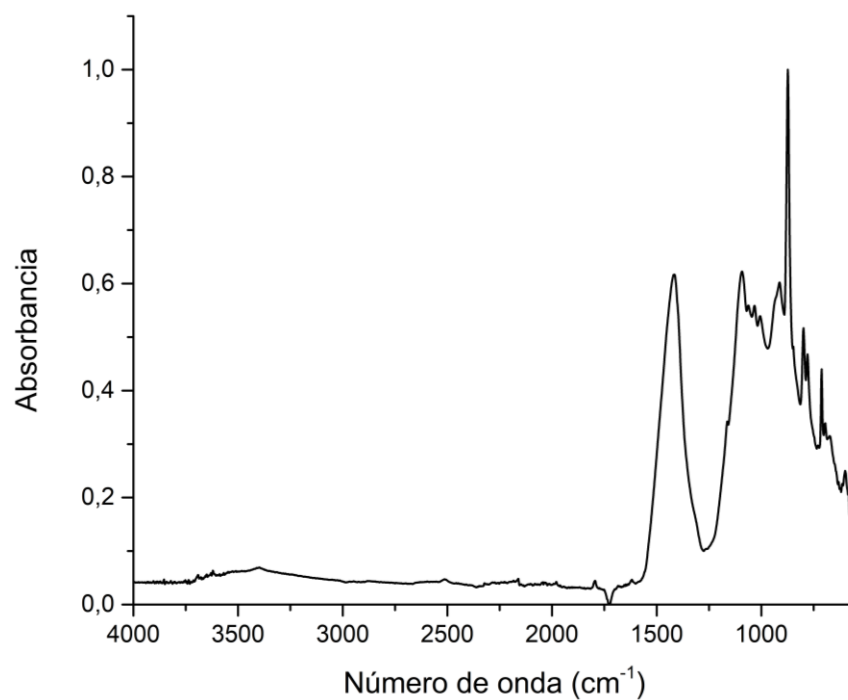
Espectro ATR-FTIR de cemento Argos blanco.



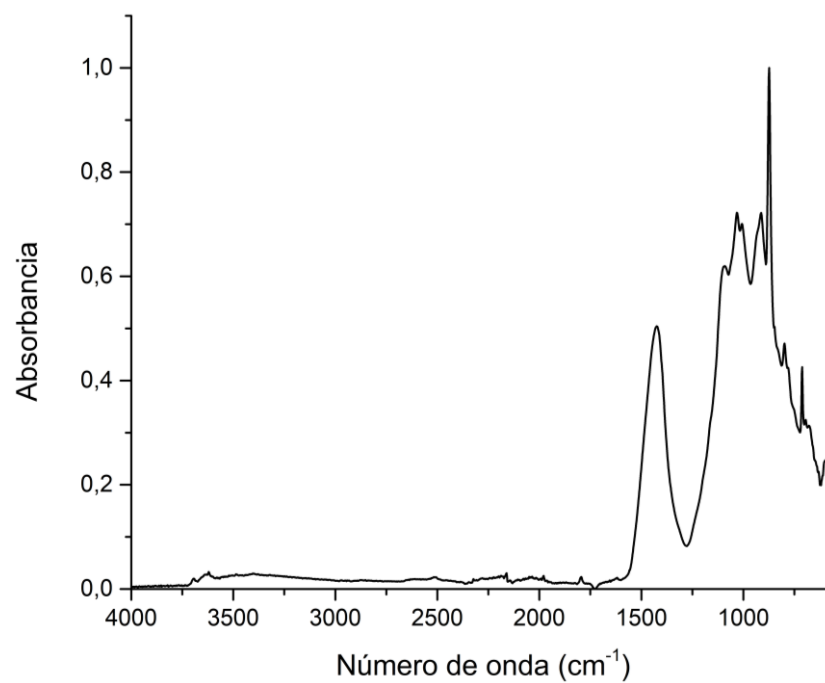
Espectro ATR-FTIR de cemento CEMEX blanco.



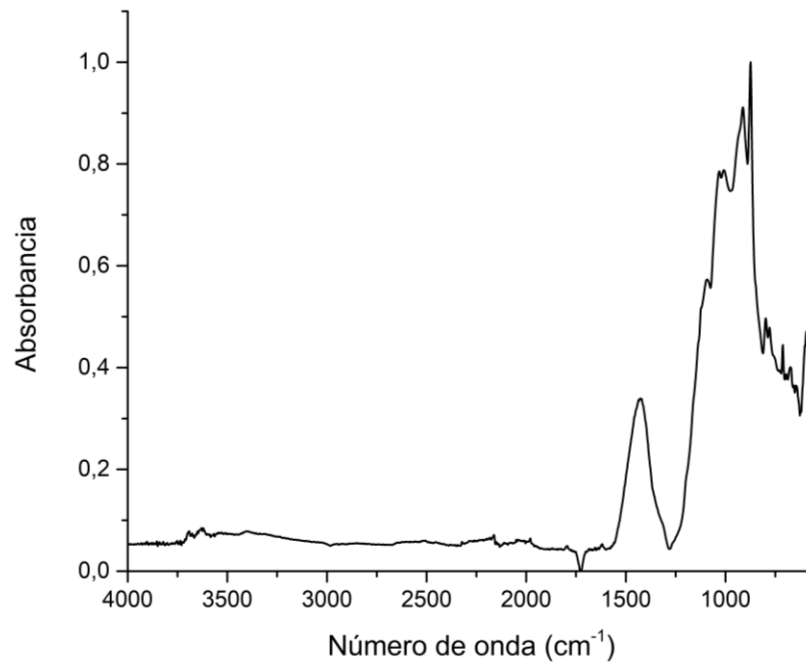
Espectro ATR-FTIR de cemento Argos general.



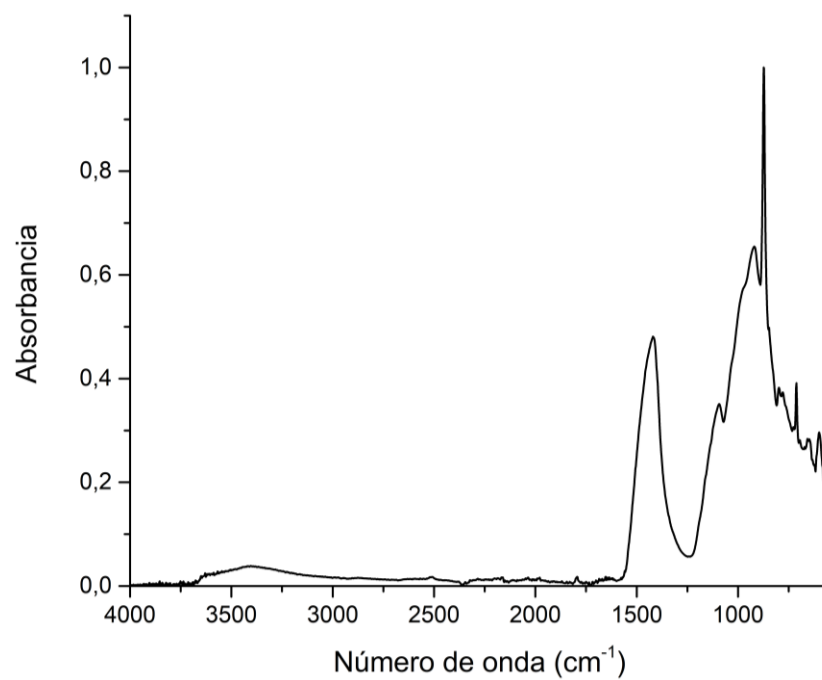
Espectro ATR-FTIR de cemento CEMEX general.



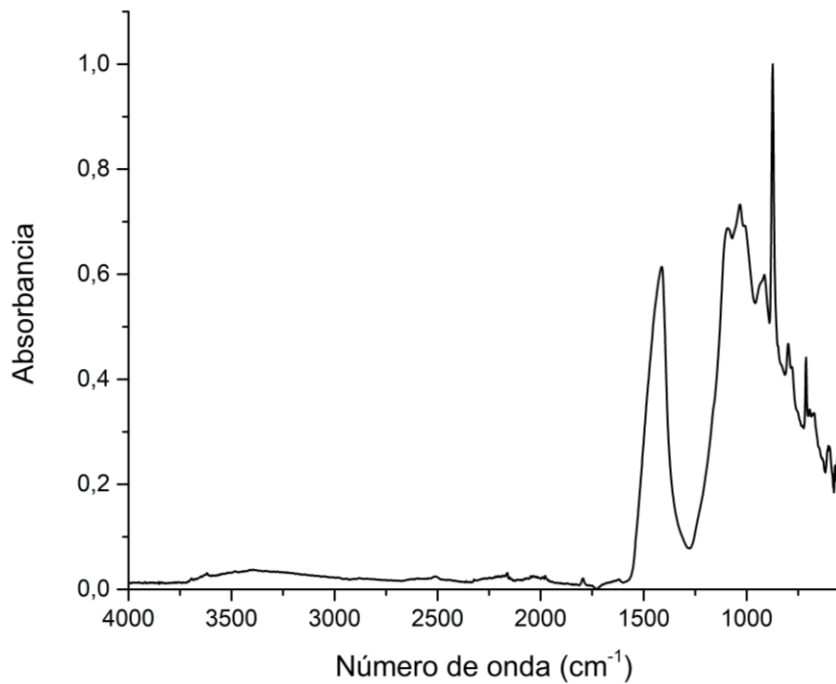
Espectro ATR-FTIR de cemento Holcim general.



Espectro ATR-FTIR de cemento Tequendama general.

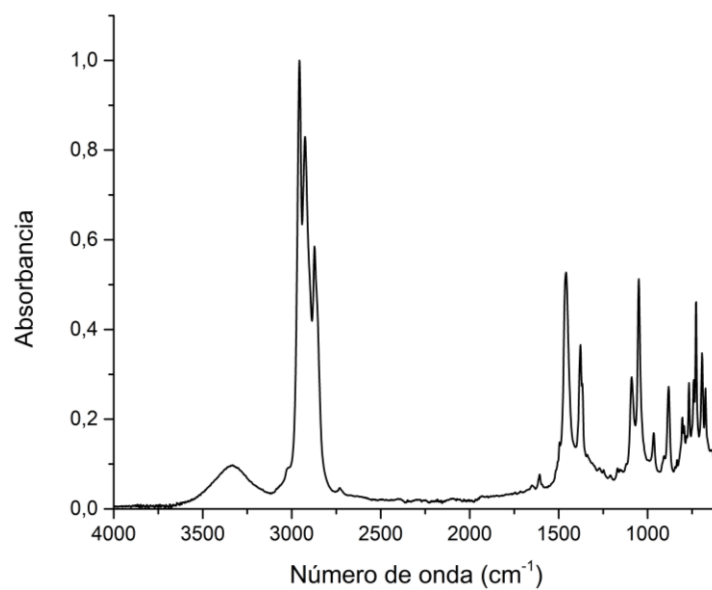


Espectro ATR-FTIR de cemento CEMEX estructural.

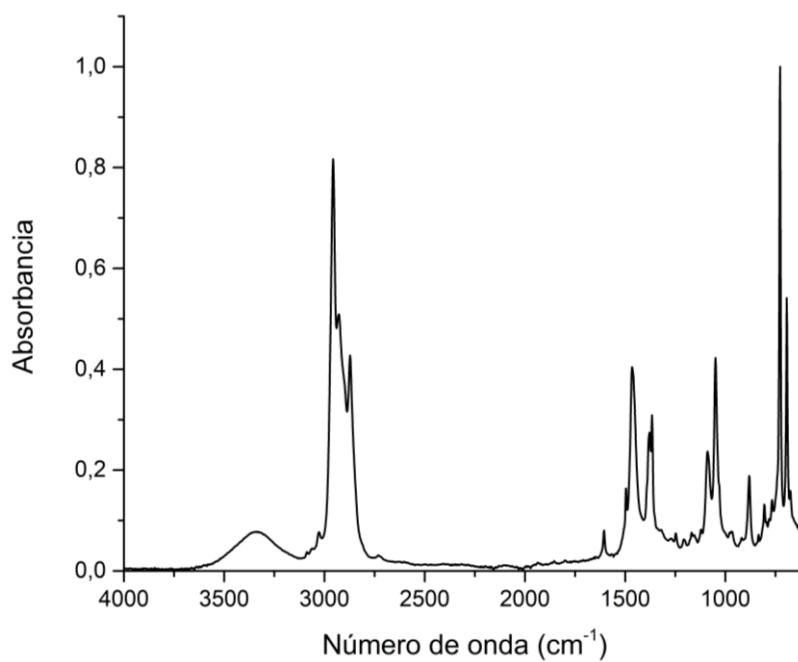


Espectro ATR-FTIR de cemento Holcim estructural.

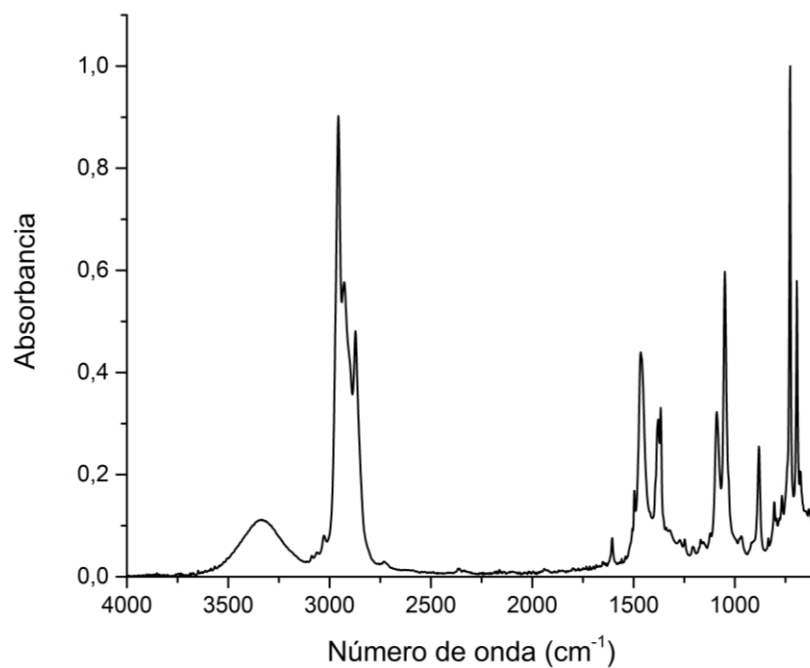
Anexo 5. Espectros ATR-FTIR de gasolinas.



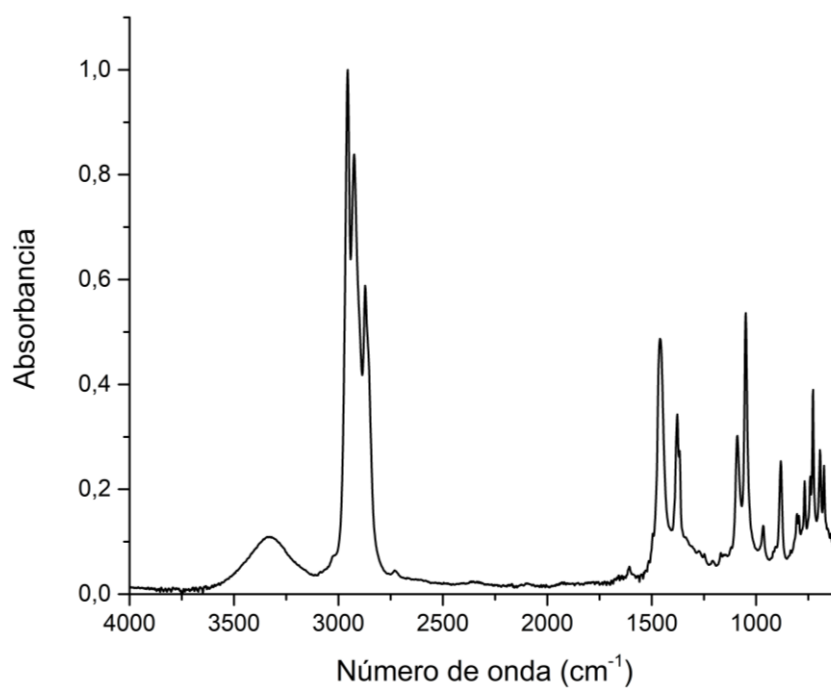
Espectro ATR-FTIR de gasolina corriente de Bucaramanga.



Espectro ATR-FTIR de gasolina extra de Bucaramanga.

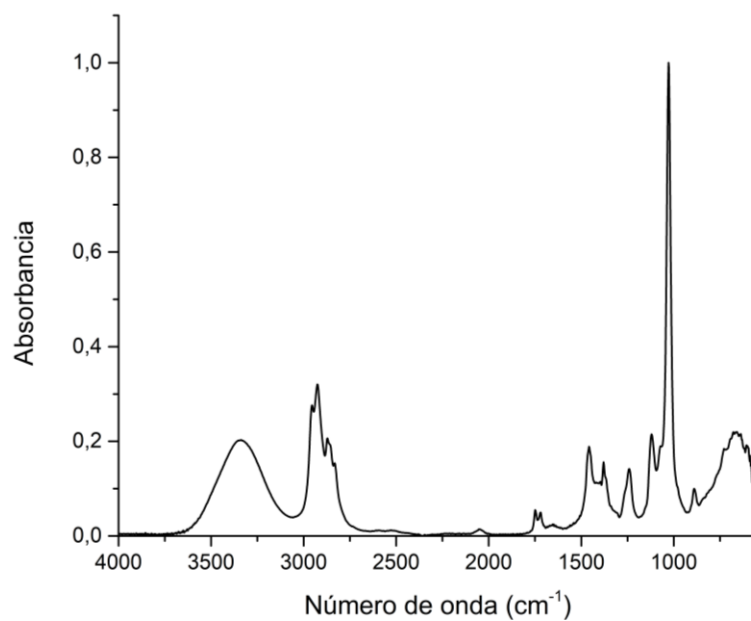


Espectro ATR-FTIR de gasolina extra Pamplona.

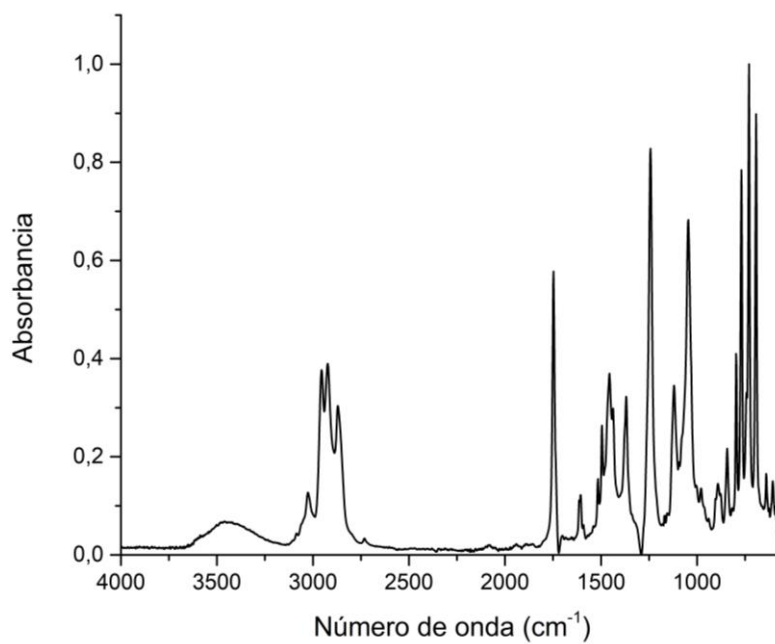


Espectro ATR-FTIR de gasolina corriente de Pamplona.

Anexo 6. Espectros ATR-FTIR de muestras de thinner.



Espectro ATR-FTIR de thinner Quisansol.



Espectro ATR-FTIR de thinner America Logistic.