



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN  
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



# **Aplicación de métodos de análisis multivariado para la evaluación cualitativa y cuantitativa a imágenes hiperespectrales de componentes lignocelulósicos obtenidas mediante microespectroscopía infrarroja**

---

Tesis presentada a la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Concepción para optar al grado de Licenciado en Análisis Químico y al Título de Químico Analista

Por  
Silenne Vinet Inostroza  
Profesor Guía  
Dra. Rosario Castillo Felices

Octubre 2017  
Concepción, Chile

## RESUMEN

La microespectroscopía FTIR es una herramienta innovadora con varias aplicaciones en el campo de la química analítica. Esta tesis se enfoca en la técnica de microespectroscopía FTIR en modo ATR y su aplicación como método de análisis no destructivo para caracterizar químicamente tanto mezclas sintéticas de lignina y celulosa como biomasa lignocelulósica, en específico, *Pinus radiata* con pre tratamiento Organosolv. Además de identificar componentes químicos, se estudió la microestructura de la madera y la distribución de sus componentes, y su relación con el rendimiento de etanol del proceso de sacarificación y fermentación simultánea.

Se determinó que los parámetros más adecuados para la toma de imágenes de muestras de madera pretratada son resolución espectral de  $8\text{ cm}^{-1}$ , tamaño de pixel  $1,56 * 1,56\ \mu\text{m}^2$  y 16 scans por pixel.

Debido a la gran cantidad de información que proporciona esta técnica, el volumen de datos obtenidos fue procesado mediante métodos quimiométricos de análisis multivariado. Se utilizó análisis de componentes principales (PCA) para separar e identificar componentes en la superficie de la fibra de madera y resolución de curva multivariada con mínimos cuadrados alternados (MCR-ALS) para reconstruir los espectros de cada componente puro.

Se observó presencia de aglomeraciones de lignina G formando estructuras esféricas coalescentes en la superficie de la fibra y por fuera de la pared celular.

Para evaluar la capacidad de la microespectroscopía ATR-FTIR como método cuantitativo, se realizó una calibración mediante mínimos cuadrados parciales (PLS) sobre una cantidad de muestras de mezcla sintética de lignina y celulosa para crear un modelo que relacione la concentración de estos compuestos con sus espectros. Los resultados obtenidos fueron de RMSEC de 1,99 %, RMSECV de 2,63% y RMSEP de 1,84%, y  $R_{\text{cal}}$  de 0,993,  $R_{\text{val}}$  de 0,983 y  $R_{\text{pred}}$  de 0,995, para ambos compuestos, los que indican que el modelo es de buena capacidad de predicción.