UAM IZTAPALAPA

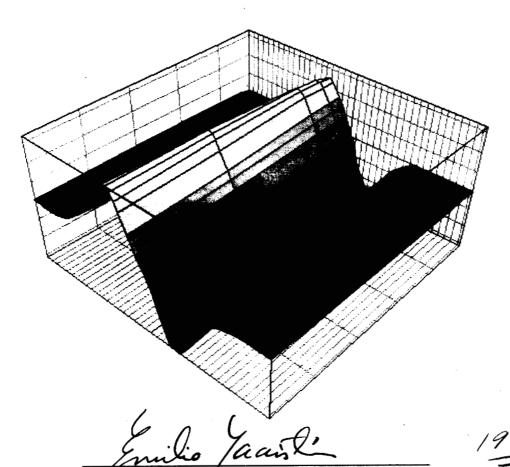
Casa Abierta al Tiempo

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Condensador de Aspiración Barrido para el Monitoreo de Gases Anestésicos

Ing. Andro A. Solis M.

Maestría en Ing. Biomédica



Asesor: Dr. Emilio Sacristán Rock

ÍNDICE

Indice	i
Relación de figuras	v
Relación de tablas	vi
Resumen	vii
Agradecimientos	viii
I Introducción y Objetivos	1
1.1. Objetivos	1
II Antecedentes e importancia de la investigación	3
2.1. Administración de la anestesia	3
2.2. El monitoreo en el quirófano	3
2.2.1. Monitoreo de la ventilación y gases	5
2.2.1.1. Monitoreo de oxígeno	5
2.2.1.2. Monitoreo de dióxido de carbono	6
2.2.1.2.1. El capnograma	7
2.2.1.3. Monitoreo de óxido nitroso	8
2.2.1.4. Monitoreo de nitrógeno	8
2.2.1.5. Monitoreo de agentes anestésicos volátiles	9
2.3. Requerimientos clínicos del monitor de anestesia.	9
2.4. Tecnologías de medición.	10
2.4.1. Cromatografia de gases.	10
2.4.2. Espectrometría de masa.	11
2.4.3. Espectrometría por radiación infrarroja.	14
2.4.4. Espectrometría por difracción Raman.	15
2.4.5. Análisis piezoeléctrico.	17
2.4.6. Espectrometría por movilidad iónica (IMS).	18
2.5. El condensador de aspiración diferencial.	24
2.5.1. Antecedentes.	24
2.5.1.1. El contador de aspiración.	24
2.5.1.2. El condensador de aspiración.	25
2.5.2. Condensador de aspiración diferencial de 1er orden con barrido de campo.	26
III Métodos	27
3.1. El condensador de aspiración diferencial de primer orden con barrido de campo.	27
3.1.1. Descripción general.	27
3.1.2. Funcionamiento teórico.	28
3.1.3. Descripción matemática.	29
3 1 4 I a transformada discreta de Tammet	35

3.3.1. Linealidad. 3.3.2. Respuesta al impulso. 3.3.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada. 3.3.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 3.3.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3.3.4. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 3.3.3.5. Variaciones en el flujo. 3.3.3.5. Variaciones en el flujo. 3.3.3.6. Variaciones en la placa precolectora. 3.3.3.7. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.8. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3. L. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _a -x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en el atura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.2. Relación experimental entre el condensador de aspiración y un espectrógrafo IMS.	38
3.3.2. Respuesta al impulso. 3.3.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada. 3.3.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 3.3.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 3.3.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desv. estándar). 3.3.3.4. Variaciones en el flujo. 3.3.3.5. Variaciones en la placa precolectora. 3.3.3.6. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Usriaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.5. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.6. Variaciones en la tamaño de la placa precolectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.8. Variaciones en la latura de la celda. 4.4.8. Respuesta en presencia de ruido.	3.3. Características de la transformada de Tammet.	40
3.3.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada. 3.3.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 3.3.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 3.3.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desv. estándar). 3.3.3.4. Variaciones en el flujo. 3.3.3.5. Variaciones en la placa precolectora. 3.3.3.7. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Otransformadas inversas mediante la función de relación experimental. 1V Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.5. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.6. Variaciones en la tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.7. Variaciones en la tamaño de la placa colectora (x _b). 4.3.8. Variaciones en la tamaño de la placa colectora (x _b). 4.3.9. Variaciones en la tamaño de la placa colectora (x _b). 4.3.9. Variaciones en el ancho de la celda.	3.3.1. Linealidad.	40
3.3.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 3.3.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 3.3.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desv. estándar). 3.3.3.4. Variaciones en el flujo. 3.3.3.5. Variaciones en la placa precolectora. 3.3.3.6. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.3. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.4. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.3.2. Respuesta al impulso.	40
3.3.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 3.3.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desv. estándar). 3.3.3.4. Variaciones en la placa precolectora. 3.3.3.5. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimentale. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Uriaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.1. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.2. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en la cantidad de species iónicas (desviación estándar). 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _a -x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en el ancho de la celda.	3.3.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada.	41
3.3.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desv. estándar). 3.3.3.4. Variaciones en el flujo. 3.3.3.5. Variaciones en la placa precolectora. 3.3.3.6. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. La función G inversa. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (xaxa). 4.3.7. Variaciones en el atmaño de la placa colectora (xaxa). 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4.8. Respuesta en presencia de ruido.	3.3.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud).	41
3.3.3.4. Variaciones en el flujo. 3.3.3.5. Variaciones en la placa precolectora. 3.3.3.6. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (xa-xa). 4.3.7. Variaciones en el antra de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	3.3.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento).	41
3.3.3.5. Variaciones en la placa precolectora. 3.3.3.6. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _a -x _b). 4.3.6. Variaciones en el altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	3.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desv. estándar).	41
3.3.3.6. Variaciones en la placa colectora. 3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.5. Obtención de la función G experimentale. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _a -x _b). 4.3.6. Variaciones en el altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en el ancho de la celda.	3.3.3.4. Variaciones en el flujo.	42
3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.5. Obtención de la función G experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 1V Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x₀). 4.3.6. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.3.3.5. Variaciones en la placa precolectora.	42
3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5. Transformadas inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en el acantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	3.3.3.6. Variaciones en la placa colectora.	42
3.3.4. Respuesta en presencia de ruido. 3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.5. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda.	42
3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales. 3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimentale. 3.4.5. 1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en el antho de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	42
3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica. 3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en el ancho de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.3.4. Respuesta en presencia de ruido.	42
3.4.2. La base de datos de densidades de corriente. 3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.5. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales.	43
3.4.3. Transformadas directas experimentales. 3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.5. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica.	43
3.4.4. Transformadas inversas experimentales. 3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en el ancho de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.4.2. La base de datos de densidades de corriente.	43
3.4.4.1. La función G inversa. 3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en el ancho de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.4.3. Transformadas directas experimentales.	44
3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido. 3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.7. Variaciones en el ancho de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.4.4. Transformadas inversas experimentales.	44
3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales. 3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _s -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.4.4.1. La función G inversa.	44
3.4.5. Obtención de la función G experimental. 3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido.	45
3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental. IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	3.4.4.3. Transformadas inversas experimentales.	45
IV Resultados 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	3.4.5. Obtención de la función G experimental.	46
 4.1. Linealidad. 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x_b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x_a-x_b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido. 	3.4.5.1. Transf. inversas mediante la función de relación experimental.	46
 4.2. Respuesta al impulso. 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x_b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x_a-x_b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido. 	IV Resultados	47
 4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada 4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x_b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x_a-x_b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido. 	4.1. Linealidad.	47
4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud). 4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.2. Respuesta al impulso.	48
4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento). 4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada	49
4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar). 4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _s -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud).	49
4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada. 4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento).	50
4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b). 4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar).	51
4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b). 4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada.	52
4.3.7. Variaciones en la altura de la celda. 4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b).	53
4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda. 4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b).	54
4.4. Respuesta en presencia de ruido.	4.3.7. Variaciones en la altura de la celda.	55
1200publia di probendia do raido.	4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda.	56
4.5. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales.	4.4. Respuesta en presencia de ruido.	57
	4.5. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales.	60

4.5.1. Transformadas directas experimentales.	60
4.5.2. Transformadas inversas experimentales.	72
4.5.2.1. La función G inversa.	72
4.5.2.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido.	76
4.5.2.3. Transformadas inversas experimentales.	81
4.5.3. Obtención de la función experimental de relación.	84
4.5.3.1. Transf. inversas mediante la función experimental de relación.	86
V Discusión	88
5.1. La transformada de Tammet.	88
5.1.1. La transformada discreta.	88
5.1.2. La transformada inversa.	90
5.1.3. La función experimental de relación.	92
VI Conclusiones y comentarios finales.	94
6.1. Evaluación del modelo matemático y sus procedimientos.	94
Referencias	96
APÉNDICE A: Leyes de los gases.	97
A.1. Presión.	97
A.2. Ley de Boyle-Mariotte.	97
A.3. Leyes de Gay-Lussac.	97
A.3.1. Primera, o Ley de Charles.	97
A.3.2. Segunda, o Ley de los Volúmenes en Combinación.	98
A.4. El principio de Avogadro.	98
A.5. Ley de Amontons.	99
A.6. Ley de Dalton de las presiones parciales.	99
A.6.1. Difusión.	99
A.6.2. Ley de Dalton.	99
A.7. Ley de los gases ideales.	100
A.8. Los gases reales.	100
A.8.1. La ecuación de Van der Waals.	101
Referencias del Apéndice A	101
APÉNDICE B: Gases y vapores.	102
B.1. Gases.	102
B.1.1. Oxígeno.	102
B.1.2. Nitrógeno.	102
B.1.3. Óxido nitroso.	102
B.1.4. Bióxido (dióxido) de carbono.	102
B.2. Los agentes anestésicos	102
B.2.1. Los agentes anestésicos halogenados inhalables volátiles (VHAs).	104

B.3. Parámetros importantes de los anestésicos.	105
B.3.1. Presión de vapor saturado (SVP).	105
B.3.2. Punto de ebullición.	105
B.3.3. Concentración de vapor.	105
B.3.4. Concentración mínima alveolar (MAC).	105
B.3.5. PMAC1.	106
B.3.6. Gravedad específica.	106
B.3.7. Coeficiente de partición.	106
B.4. Características del agente anestésico inhalado ideal.	106
B.5. Características de los agentes anestésicos inhalados reales.	107
Referencias del Apéndice B	107
APÉNDICE C: Acerca de la radioactividad.	111
C.1. Radioactividad.	111
C.2. Radiación.	111
C.2.1. Radiación alfa.	111
C.2.2. Radiación beta.	112
C.2.3. Radiación gama.	112
C.3. El americio.	113
Referencias del Apéndice C	114
APÉNDICE D: Diseño del sistema mezclador / dosificador de anestesia.	115
D.1. Introducción.	115
D.2. El sistema completo.	115
D.2.1. Controladores de flujo.	116
D.2.2. Vaporizadores de agentes anestésicos.	116
D.2.3. Barra Selectatec TM .	118
D.2.4. Barras mezcladoras.	118
D.2.5. Sensor (condensador de aspiración).	118
D.2.6. Espectrómetro de masa.	118
D.2.7. Conectores / Válvulas de conección.	118
D.2.8. Tubería y mangueras	119
Referencias del Apéndice D	

FIGURAS:

2.1. Forma de onda normal para el CO ₂ .	8
2.2. Esquema de un cromatógrafo de gases.	10
2.3. Elementos básicos de un espectrómetro de masa.	12
2.4. Esquema de un filtro de cuadripolo.	12
2.5. Diagrama de un espectrómetro de masa compartido.	13
2.6. Esquema de un analizador de infrarrojo.	15
2.7. Sistema óptico para la observación de un espectro Raman.	16
2.8. Diagrama de un analizador por efecto Raman.	17
2.9. Esquema de un analizador piezoeléctrico.	17
2.10. Diagrama a bloques de un espectrómetro de movilidad iónica completo.	18
2.11. Esquema de un tubo de arrastre típico.	19
2.12. Respuesta del analizador IMS en función de la concentración.	23
2.13. Diagramas de diferentes tipos de contadores de aspiración.	24
2.14. El condensador de aspiración.	25
3.1. El condensador de aspiración diferencial de primer orden.	27
3.2. Respuesta de un cond. de aspiración para el halotano al 0.2% en 50% O ₂ / 50% CO ₂ .	28
3.3. Diagrama de un condensador de aspiración de primer orden.	30
3.4. Cálculo gráfico de la función G para el electrodo colector.	32
3.5. Representación de las tres áreas separadas por hipérbolas en una función G.	33
3.6. Representación tridimensional de una función G para el electrodo colector.	34
3.7. La función G vista como dos familias simétricas de triángulos.	35
4.1. Linealidad de la transformada.	47
4.2. Respuesta al impulso.	48
4.3. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud).	49
4.4. Variaciones en la movilidad (desplazamiento).	50
4.5. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar).	51
4.6. Variaciones en el flujo del gas de entrada.	52
4.7. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (x _b).	53
4.8. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x _a -x _b).	54
4.9. Variaciones en la altura de la celda.	55
4.10. Variaciones en el ancho de la celda.	56
4.11. Efecto producido en la transf. directa por ruido en la señal de movilidad iónica.	57
4.12. Error producido en la inversa por ruido en la señal de densidad de corriente.	58
4.13. Densidades de movilidad para iones negativos en diversas concentraciones	
de enfluorano y su transformada directa.	60
4.14. Densidades de movilidad para iones positivos en diversas concentraciones	
de enfluorano y su transformada directa.	6

4.15. Densidades de movilidad para iones negativos en diversas concentraciones	
de halotano y su transformada directa.	62
4.16. Densidades de movilidad para iones positivos en diversas concentraciones	
de halotano y su transformada directa.	63
4.17. Densidades de movilidad para iones negativos en diversas concentraciones	
de isofluorano y su transformada directa.	64
4.18. Densidades de movilidad para iones positivos en diversas concentraciones	
de isofluorano y su transformada directa.	65
4.19. Comparación entre la DDTT de iones negativos de enfluorano y su respectiva	
densidad de corriente obtenida con un condensador de aspiración.	66
4.20. Comparación entre la DDTT de iones positivos de enfluorano y su respectiva	
densidad de corriente obtenida con un condensador de aspiración.	67
4.21. Comparación entre la DDTT de iones negativos de halotano y su respectiva	
densidad de corriente obtenida con un condensador de aspiración.	68
4.22. Comparación entre la DDTT de iones positivos de halotano y su respectiva	
densidad de corriente obtenida con un condensador de aspiración.	69
4.23. Comparación entre la DDTT de iones negativos de isofluorano y su respectiva	
densidad de corriente obtenida con un condensador de aspiración.	70
4.24. Comparación entre la DDTT de iones positivos de isofluorano y su respectiva	
densidad de corriente obtenida con un condensador de aspiración.	71
4.25. Comparación de la función G y la función G inversa.	72
4.26. Comparación de funciones G inversas para diferentes esquemas de muestreo.	75
4.27. Métodos de interpolación y filtrado y los errores que producen.	76
4.28. Interpolación aplicada a datos exp. de densidad de movilidad para halotano.	79
4.29. Interpolación aplicada a datos exp. de densidad de corriente para halotano.	80
4.30. Transformadas inversas experimentales.	81
4.31. Funciones de relación experimentales.	84
4.32. Transformada inversa empleando la función experimental de relación.	86
D.1. Esquema del sistema mezclador / dosificador de gases anestésicos.	116
D.2. Diagrama del funcionamiento de un vaporizador.	117
TABLAS:	
2.1. Resumen de funciones monitoreadas e instrumentos utilizados durante la anestesia	4
3.1. Características del espectrómetro de movilidad iónica	43
3.2. Características del condensador de aspiración prototipo.	44
A.1. Relaciones entre diversas unidades de presión.	97
B.1. Características de los agentes anestésicos inhalados reales.	108

RESUMEN

El presente trabajo forma parte de una investigación cuyo objetivo es desarrollar un método alternativo de bajo costo, rápido y eficiente para monitorear (detectar y cuantificar) gases anestésicos. En la actualidad los altos costos y requerimientos que esto conlleva no permiten que exista un uso generalizado de aparatos que realicen esta tarea. El monitoreo de gases inspiratorios y agentes anestésicos es de vital importancia ya que aumenta la seguridad para el paciente al permitirle al anestesiólogo conocer con mayor precisión las condiciones del transporte de gases hasta los tejidos durante la anestesia, pudiendo asi mantener el metabolismo celular y el nivel de anestesia.

En esta tesis se presenta en detalle el prototipo de un sensor de construcción muy sencilla y de bajo costo que sirve como base para un sistema de identificación y medición de gases anestésicos. Se presenta además la teoría matemática de su funcionamiento y su relación con la espectrometría de movilidad iónica, particularmente definida por una transformada matemática que se desarrolla de manera continua. Se describe a esta transformada en forma discreta y se introduce la correspondiente transformada inversa. Se presentan análisis de resultados experimentales obtenidos con un condensador de aspiración para algunos gases anestésicos, la aplicación de la teoría matemática desarrollada y su relación con resultados prácticos obtenidos mediante un espectrómetro de movilidad iónica.

Finalmente, se evalúa el desarrollo actual de la tecnología presentada, sus características y limitaciones, y se presentan parámetros de diseño y estudio para la continua evolución de la línea de investigación.

Con este estudio se sientan las bases para el diseño de sistemas que utilicen esta tecnología, tomando en cuenta las características que se definen, así como los requerimientos de la estrategia de muestreo que se deben llenar para lograr un desempeño adecuado.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue iniciado, desarrollado y llevado a buen término gracias al invaluable e incondicional apoyo del Creador, y a Él está dedicada.

Quiero agradecer de primera instancia a los distinguidos miembros del comité de evaluación para este proyecto por su guía y ayuda incondicional, y de forma muy particular al Dr. Emilio Sacristán Rock, mi asesor y amigo, quien contribuyó en cada aspecto de la investigación.

En este trabajo se utilizan bases de datos obtenidas para su tesis de maestría por el Ing. Robert Rosenblatt utilizando un condensador de aspiración diseñado por el Dr. Emilio Sacristán en el Instituto Politécnico de Worcester, Massachusetts, EUA, asi como bases de datos obtenidas por el Dr. Emilio Sacristán en el departamento de física de la Universidad Tecnológica de Tampere en Finlandia, utilizando un espectrómetro de movilidad iónica.

También agradezco la cooperación de mis compañeros en el desarrollo de esta investigación, Ing. Andrés Ramírez Ferreyra e Ing. Rosendo Fuentes, sin cuya ayuda este trabajo hubiera sido prácticamente imposible.

Agradezco a CONACYT el apoyo económico brindado durante los primeros dos años de estudios.

Finalmente, extiendo mi gratitud a mi familia por su paciencia y el apoyo que me brindaron.

AASM

I INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

Este trabajo forma parte de una investigación global cuyo objetivo es desarrollar un método rápido y eficiente para monitorear (detectar y cuantificar) gases anestésicos a fin de reducir los altos costos y requerimientos que esto conlleva en la actualidad, los cuales no permiten que exista un uso generalizado de aparatos que realicen esta tarea. El monitoreo de agentes anestésicos aumenta la seguridad para un paciente quirúrgico y estándares mínimos para este fin han generado una reducción en la tasa de mortalidad relacionada con la anestesia [1].

Sacristán [2,3] ha desarrollado el prototipo de un sensor conocido como condensador de aspiración (sección 2.5), el cual representa una alternativa de bajo costo a la tecnología de espectrometría por movilidad de iones [4] o IMS (sección 2.4.6) y que se basa en métodos de aspiración [5] así como en el mismo IMS. Mediante un aparato IMS se obtienen lecturas que pueden presentarse en el dominio de la movilidad iónica, y de manera análoga las lecturas obtenidas mediante el condensador de aspiración pueden presentarse en el mismo dominio mediante una transformada lineal. Ya se han llevado a cabo algunos experimentos preliminares con el condensador [2,6,7] que han servido como fundamento para este trabajo. En ellos se ha utilizado el condensador de aspiración para hacer mediciones que caracterizan diferentes concentraciones de agentes anestésicos y gases portadores.

La finalidad principal de esta tesis es el estudio y análisis teórico y práctico de un modelo matemático desarrollado para el dispositivo mencionado de manera que permita describir la operación de los condensadores de aspiración, pudiendo con ello determinar la forma correcta de hacer un muestreo con el sensor y además obtener curvas de distribución de movilidad iónica a partir de las curvas obtenidas por el sensor y vice versa.

1.1. Objetivos

- Analizar las ecuaciones que describen matemáticamente la corriente producida por el sensor debido a los iones generados en su interior con relación al voltaje aplicado.
- Encontrar ecuaciones que describan el proceso inverso, es decir, la distribución de movilidad iónica en función de la corriente generada por el sensor.
- Aplicar la descripción matemática a una base de espectros de movilidad iónica que incluye muestras obtenidas mediante un espectrómetro de movilidad iónica y comparar los resultados con aquellos obtenidos en forma experimental mediante un condensador de aspiración.
- Aplicar la descripción matemática inversa a la base de datos experimental existente, obtenida mediante un condensador de aspiración prototipo y comparar los resultados con aquellos obtenidos en forma experimental mediante el espectrómetro de movilidad iónica.

- Determinar los criterios de aplicación de las ecuaciones mediante análisis del modelo y
 evaluación de las bases de datos existentes a fin de delinear el método óptimo de obtención de
 una nueva base de datos para el futuro desarrollo de la investigación.
- Evaluar el modelo existente a fin de determinar su aplicablidad, generalidad y limitaciones.
 Esto permitirá desarrollar un modelo mas adecuado si es necesario, incluyendo efectos de orden superior que incrementen la exactitud del modelo, amén de incrementar también su complejidad.
- Así mismo, la evaluación de los resultados permitirá establecer los parámetros de diseño de un nuevo condensador de aspiración prototipo para el continuo desarrollo del proyecto global de investigación.

II ANTECEDENTES E IMPORTANCIA DE LA INVESTIGACIÓN

2.1. Administración de la anestesia

El sistema de administración de la anestesia consiste en una máquina de anestesia, un circuito de respiración para el paciente, un ventilador y un equipo de vías aéreas. La máquina consiste a su vez de una unidad de suministro de gases (oxígeno / óxido nitroso) y al menos un vaporizador de agente anestésico primario. El circuito de respiración consta de un lazo cerrado de tubería, que a su vez contiene dos válvulas de respiración unidireccional y una válvula limitadora de presión ajustable (APL), un absorbedor de CO₂, una válvula para permitir la salida de gases en exceso, un humidificador (opcional) y un ventilador manual o automático. El equipo para el manejo de vías aéreas incluye una máscara o un tubo endotraqueal, los cuales son la interfase del paciente al circuito.

Aunque este sistema es simple y confiable, tiene siempre problemas que pueden afectar el desempeño y la seguridad. En la actualidad estos riesgos se reducen mediante el monitoreo clínico, y la tendencia hacia el futuro indica que el sistema se automatizará e integrará con el monitoreo, simplificando lo mas posible los diseños y la operación, reduciendo tamaño y costo.

El trabajo del anestesiólogo, por otro lado, involucra el mantenimiento del equilibrio de las funciones vitales del organismo ante los efectos de la operación quirúrgica, infecciones e intervención farmacológica (los agentes anestésicos incluidos). En vista de ello, y tomando en cuenta la discusión presentada, es evidente la necesidad de un monitoreo constante de los agentes anestésicos por seguridad del paciente, y no solo de éste, sino también del personal clínico que de alguna u otra manera está expuesto a pequeñas pero acumulativas dosis de anestésicos halogenados que pueden llegar a causar daños hepáticos por exposición crónica. Además, de aumentar la seguridad, el monitoreo permite también la mejor regulación de la anestesia.

Debido al alto costo del monitoreo y de otros gastos en general, este servicio no se presta para todos los pacientes. Este problema es alarmantemente mayor en los países subdesarrollados, en donde no existen estándares de monitoreo y los hospitales tienen un presupuesto mucho menor que en otros países. Existe una gran necesidad de tecnología y equipo para la medición de gases que sea pequeño, eficiente, preciso y constante, para permitir el monitoreo de toda actividad anestesiológica.

2.2. El monitoreo en el quirófano

Cuando se introdujo la anestesia poco después de 1840, pronto surgió el reconocimiento de que los agentes anestésicos interfieren con la estabilidad cardiovascular y respiratoria, además

de producir insensibilidad o letargo. Para proteger al paciente de complicaciones producidas por el proceso de inducción y cualquier efecto secundario producido por la anestesia y el proceso operatorio, el anestesista observaba el color del paciente, le tomaba el pulso y seguía de cerca su respiración [8]. Tardó aproximadamente medio siglo el poder monitorear la presión sanguínea de un paciente bajo anestesia, y solo después de la segunda guerra mundial el electrocardiógrafo hizo su aparición en los quirófanos.

Desde entonces han sido introducidos nuevos instrumentos al arsenal del anestesista, logrando con ellos hacer posibles muchos procedimientos quirúrgicos que sin instrumentos se consideraban imposibles en los días anteriores a la anestesiología moderna. En la tabla 2.1 se muestran algunos sistemas monitoreados y los instrumentos mediante los cuales se hace.

Instrumento o monitor	Variable de interés
Analizador de oxígeno	Oxígeno inspirado
Analizador transcutáneo de O ₂	Oxígeno en la sangre
Oxímetro de pulso	Oxígeno en la sangre
Espirómetro	Volumen
Medidor de presión	Presión
Capnógrafo	CO ₂
Capnógrafo	CO2 alveolar
Analizador de gases sanguíneos	CO ₂ sanguíneo
Analizador de CO ₂ transcutáneo	CO ₂ sanguíneo
Espirómetro	Volumen de respiración
Estetoscopio	Volumen de respiración
Electrocardiograma	Bombeo y sistema circulatorio
Presión arterial	Bombeo y sistema circulatorio
Presión venosa	Bombeo y sistema circulatorio
Estetoscopio	Bombeo
Ecocardiograma	Bombeo y sistema circulatorio
Gasto cardíaco	Bombeo y sistema circulatorio
Electroencefalograma	Función eléctrica
Potenciales evocados	Función eléctrica
Evaluación clínica	Función fisiológica
Evacuación de orina	Volumen
Análisis de electrolitos	Función fisiológica
	Analizador de oxígeno Analizador transcutáneo de O2 Oxímetro de pulso Espirómetro Medidor de presión Capnógrafo Capnógrafo Analizador de gases sanguíneos Analizador de CO2 transcutáneo Espirómetro Estetoscopio Electrocardiograma Presión arterial Presión venosa Estetoscopio Ecocardiograma Gasto cardíaco Electroencefalograma Potenciales evocados Evaluación clínica Evacuación de orina

Tabla 2.1. Resumen de algunas funciones monitoreadas e instrumentos utilizados durante la anestesia.

En general, el mayor interés del monitoreo se centra en aquellos sistemas que pueden sufrir mayor daño por insuficiencia de circulación y oxigenación, y menos en la profundidad de la anestesia. Esto refleja la idea de que el paciente puede morir o sufrir daño cerebral o del corazón no porque la anestesia profunda sea peligrosa en sí, sino porque los efectos secundarios de la anestesia pueden afectar la ventilación y la circulación y, consecuentemente, la oxigenación del cerebro, corazón y riñones, los órganos más vulnerables cuando ocurre una calamidad anestesiológica. Sin embargo, en años recientes se ha demostrado que el monitoreo de agentes anestésicos aumenta la seguridad para un paciente quirúrgico y estándares mínimos para este fin han generado una reducción en la tasa de mortalidad relacionada con la anestesia y las complicaciones operatorias relacionadas con su utilización [1].

2.2.1. Monitoreo de la ventilación y gases

Durante la anestesia general la mayoría de los pacientes son paralizados con medicamentos disruptores de la función neuromuscular, y por tanto no pueden respirar por si mismos, dependiendo así de una ventilación mecánica. Es entonces importante monitorear esta ventilación ya que pueden presentarse situaciones en las que los sistemas mecánicos dejan de funcionar, se obstruyen o desconectan, o simplemente no satisfacen las necesidades respiratorias del paciente, sobre/subventilándolo. Esto se refleja directamente en el sistema respiratorio cuando se presentan fluctuaciones atípicas de presión, volúmenes inapropiados de gas exhalado, o ausencia de CO₂ en éste. Entonces, para monitorear la ventilación, los gases de los flujos inspiratorio y exhalatorio deben ser medidos. Los mas importantes de éstos son el oxígeno, el dióxido de carbono, los gases y vapores anestésicos, y el nitrógeno. Casi todos los pacientes que requieren anestesia general reciben dosis cuidadosamente administradas de anestésicos gaseosos incluyendo óxido nitroso, desfluorano, enfluorano, halotano, isofluorano o sevofluorano.

2.2.1.1. Monitoreo de oxígeno

La importancia de una suficiencia de oxígeno es obvia. La primera línea de defensa contra la hipoxemia (deficiencia en la oxigenación sanguínea) es la oxigenación de la mezcla de gases. Por otro lado, una hiperoxigenación puede provocar problemas como sensación (conciencia), daño pulmonar y ocular, y fuego en los conductos de ventilación si se está operando con láser. Además, el conocimiento del nivel de oxígeno exhalado permite estimar la tasa metabólica del paciente, su consumo de oxígeno, su gasto cardíaco, y puede ayudar en el diagnóstico de la hipertermia maligna. Una diferencia positiva alta entre el oxígeno inspirado y el existente al final de la respiración es un indicador sensible de hipoventilación. El uso del análisis de oxígeno puede utilizarse para detectar desconecciones en el sistema de respiración, pero no debe dependerse

únicamente de él para este propósito. La concentración de óxido nitroso, por otro lado, puede estimarse en ocasiones (dependiendo de la mezcla gaseosa suministrada) a partir de la concentración de oxígeno.

Los niveles de oxígeno pueden determinarse mediante espectrometría de masa (sección 2.4.2), difracción Raman (sección 2.4.4), análisis electroquímico o análisis paramagnético. El análisis electroquímico puede medir las concentraciones promedio en los flujos inspiratorio y exhalatorio. Los otros tres métodos tienen una respuesta lo suficientemente rápida para poder medir los niveles inspirados y del final de la respiración. Los análisis electroquímicos y paramagnéticos miden únicamente oxígeno mientras que la espectrometría de masa y la espectrometría Raman pueden medir además otros gases.

2.2.1.2. Monitoreo de dióxido de carbono

El análisis de CO₂ representa una forma adecuada de comprobar la ventilación y puede detectar muchos problemas relacionados con el equipo o con el mismo paciente que otros monitores pueden no detectar o hacerlo con insuficiente rapidez como para no poner en peligro la integridad del paciente.

La capnometría se refiere a la medición y despliegue del nivel de dióxido de carbono durante el ciclo respiratorio. El capnógrafo es el aparato que realiza esta medición. El nivel de CO₂ puede reportarse ya sea en porcentaje o en presión parcial. Se puede desplegar de forma continua o en valor pico (generalmente al final de cada respiración). Puede, además, mostrar el nivel mínimo inspiratorio.

El ciclo respiratorio (es decir, inspiración - exhalación) se define en términos de la medición de CO₂ de manera que los valores al final de la respiración de otros gases depende de ésta. El dióxido de carbono se forma en las células corporales como un producto del metabolismo, es transportado por la sangre, y eliminado a través de los pulmones por ventilación de los alveolos, y por ello el monitoreo de este gas proporciona información sobre la tasa, frecuencia y profundidad de la respiración, y es un indicador de la tasa metabólica del organismo y la profundidad de la anestesia.

Las causas de un incremento del CO₂ incluyen: aumento de la temperatura corporal, escalofríos, convulsiones, producción excesiva de quetocolaminas, administración de sangre o bicarbonato, desprendimiento de una pinza arterial o torniquete, presencia de glucosa en el fluido intravenoso, hiperalimentación parenteral (alimentación por una vía no alimentaria), dióxido de carbono utilizado para distender la cavidad peritoneal durante una laparoscopía o una articulación durante una artroscopía, hipoventilación y obstrucción de las vías aéreas superiores, bloqueo en las tuberías del ventilador, falla en las válvulas, y un absorbedor de CO₂ inexistente o saturado. Por otro lado, el CO₂ disminuye con bajas en la temperatura, aumento en la relajación muscular, una mayor profundidad de la anestesia, decremento del gasto cardíaco, circulación periférica

dañada, una obstrucción pulmonar, hiperventilación, apnea (falta de respiración temporal), desconección o mal funcionamiento del ventilador, así como fugas en las tuberías.

De gran importancia es la detección temprana mediante el monitoreo del síndrome de hipertermia maligna, que se refleja por un incremento masivo del dióxido de carbono tiempo antes del aumento de la temperatura. Otro problema que permite detectar el capnograma es la acidosis respiratoria, o retención de dióxido de carbono en el cuerpo.

El CO₂ exhalado es un mejor indicador de la presencia de la circulación que el ECG, el pulso o la presión sanguínea. La eficacia de procedimientos de resucitación puede decidirse mediante la capnometría.

2.2.1.2.1. El capnograma

La habilidad de observar e interpretar las formas de onda del nivel de CO₂ exhalado proporcionadas por un capnógrafo permite, además de diagnosticar problemas, determinar los ciclos de la respiración, importante para aquel monitoreo que deba realizarse respiración a respiración, lo cual significa un monitoreo mas preciso para la inducción controlada en tiempo real. La onda debe examinarse sistemáticamente identificando en ella la amplitud, frecuencia, ritmo, línea de base y forma. La amplitud depende del nivel de dióxido de carbono al final de la respiración. La frecuencia depende de la tasa respiratoria. El ritmo depende del estado del ventilador. La línea de base debe ser cero (a menos de que se agregue CO₂ de manera intencional a la mezcla de gases respiratorios).

La forma de onda normal se ilustra en la figura 2.1. Unicamente una forma de onda se considera como normal. La primera fase de la respiración comienza en el punto A (Fracción inspirada de CO₂, F_i CO₂). Durante esta fase el nivel de CO₂ al final de la respiración es cero. El gas exhalado es gas de espacio muerto del tubo traqueal, bronquios y bronquiolos, y tiene el mismo nivel de CO₂ que la porción de la inhalación anterior.

La segunda fase comienza en el punto B y continúa hasta el punto C. Conforme el gas alveolar comienza a ser exhalado el nivel de dióxido de carbono aumenta rápidamente (BC). El gas exhalado durante esta fase es una combinación de gas alveolar y de gas de espacio muerto.

La tercera fase de la exhalación comienza en el punto C y continúa hasta justo antes del punto D. Conforme se exhala el dióxido de carbono de los alveolos, se alcanza un nivel (CD) que nunca es absolutamente plano. La última porción del gas exhalado, identificado por el punto D (fracción expirada de CO₂, F_e CO₂, o End Tidal CO₂, E_tCO₂), se denomina punto final de la respiración. El nivel de CO₂ se encuentra al máximo en este punto. En individuos normales este punto se encuentra de 5% a 5.5%, o 35 a 40 torr. Es en esta fase donde se encuentra la mayor indicación de si existe daño aéreo. Una pendiente exagerada indica una obstrucción del flujo. El nivel de gas en el punto final de la respiración es el más indicativo del nivel de gas en los

alveolos. Conforme el paciente inhala, el nivel de dióxido de carbono disminuye abruptamente a cero (DE) y ahí permanece hasta la próxima exhalación.

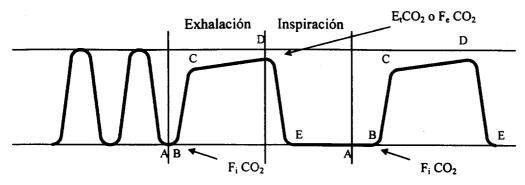


Figura 2.1. Forma de onda normal para CO₂.. A la izquierda se muestra una grabación lenta. Las curvas son delgadas y largas y se encuentran juntas. Todos los picos tienen la misma amplitud. A la derecha se muestran dos formas de onda individuales, cada una representando un único ciclo exhalación / inhalación. AB es la exhalación de gas libre de CO₂ del espacio muerto al principio de la exhalación. BC representa el vaciado de las vías aéreas y el comienzo del vaciado de los alveolos. CD muestra la meseta exhalatoria o alveolar. El punto D muestra la mejor aproximación al nivel de CO₂ alveolar. DE representa la caída abrupta de dióxido de carbono que ocurre cuando el paciente inspira gas libre de CO₂. EA muestra el final del ciclo durante el cual el nivel de CO₂ se mantiene en cero.

2.2.1.3. Monitoreo de óxido nitroso

El óxido nitroso es un anestésico secundario, utilizado para disminuir la cantidad de anestésico primario utilizado, generalmente mas potente y caro, y su monitoreo puede mostrar si los flujómetros funcionan de forma apropiada. Al final de una operación la eliminación del N₂O previene la hipóxia por difusión en la cual el óxido nitroso ocupa el lugar del oxígeno. Se puede disminuir el nivel de óxido nitroso simplemente por permitir la respiración de aire limpio. El óxido nitroso puede medirse utilizando espectrometría de infrarrojo, de masa o de Raman.

2.2.1.4. Monitoreo de nitrógeno

Un aspecto importante del monitoreo de nitrógeno es el asegurar una desnitrogenación adecuada previa a la inducción anestésica para que ésta sea más rápida. Esto es de importancia especial en pacientes pediátricos y en pacientes con problemas pulmonares. Es de ayuda también en la detección de embolismos (si hay sangre expuesta ésta puede producir coágulos y causar una embolia). Por otro lado, no siempre es deseable la ausencia del nitrógeno y en algunos casos se utiliza como gas de relleno. El N₂ puede detectarse mediante espectrometría de masa o Raman, o puede determinarse por exclusión si éste se utiliza como gas de relleno, es decir, una vez

determinada la cantidad de otros gases presentes, lo que resta debe ser nitrógeno (con concentraciones mínimas de otros gases que afectan de manera despreciable este resultado).

2.2.1.5. Monitoreo de agentes anestésicos volátiles

La medición de estos gases se está convirtiendo en práctica común. Una ventaja de hacerlo reside en la capacidad resultante de comprobar la precisión de los vaporizadores. Además, se puede detectar un agente incorrecto, el uso de más de un agente a la vez (lo cual potencía su efecto, algo indeseable y peligroso), y permite determinar flujos fuera del rango para el cual se calibra el vaporizador, indica cuando existe una falla en el suministro, o cuando el vaporizador se encuentra vacío. El aspecto mas importante radica en la medición de fracciones inspiradas y expiradas de agente anestésico para estimar la proporción de éste que se encuentra presente en el cuerpo. La fracción expirada de agente anestésico representa la mejor aproximación a la concentración de éste que se encuentra presente en la circulación alveolar, y con ella puede controlarse con mayor precisión la dosis y profundidad de la anestesia.

2.3. Requerimientos clínicos de un monitor de gases de anestesia [2]

Los gases a ser analizados son tomados directamente del aliento del paciente en un sistema semi-cerrado, por lo cual el volumen de la muestra debe ser lo mas pequeño posible. En pacientes adultos se acepta clínicamente un flujo de muestreo de 200 ml/min. Para pacientes pediátricos el flujo de muestreo debe ser menor a 80 cc/min. Además, si el monitoreo ha de ser continuo, o al menos de respiración a respiración para permitir un control mas fino del proceso de anestesia, el tiempo entre muestras debe ser menor a 200 ms. La muestra es tomada bajo distintas condiciones de temperatura, presión y concentraciones de gases y vapor de agua, por lo que todos estos efectos deben ser tomados en cuenta, controlados y/o compensados para no afectar la precisión del sistema. El exceso de vapor de agua, por ejemplo, debe ser eliminado para evitar su condensación.

El analizador/monitor de anestesia debe, idealmente, ser capaz de reconocer y medir la concentración de los cinco agentes halogenados, halotano, isofluorano, enfluorano, desfluorano y sevofluorano, en muestras de gas exhalado e inspirado. La precisión que se requiere es de ±0.2%Vol, sobre un rango de 0.1%Vol a 5.0%Vol de concentración, excepto en el caso del enfluorano que puede llegar hasta 7%Vol, y el desfluorano que puede llegar hasta 18%Vol.

Otros gases que se pueden medir y que, aunque no es indispensable, sería útil poder reconocer y cuantificar son: O₂, que mantiene el metabolismo, CO₂, que es un producto del metabolismo y N₂O, un anestésico auxiliar.

2.4. Tecnologías de medición

2.4.1. Cromatografía de gases

El término de cromatografia de gases se usa para describir el proceso por el cual mezclas complejas son separadas por partición selectiva entre un gas en estado móvil y un gas, líquido o sólido en estado estacionario [9]. En algunas ocasiones, como en el caso que nos ocupa, los compuestos que se separan son gases, pero también pueden ser vapores obtenidos de muestras sólidas o líquidas.

El equipo que se usa generalmente para realizar la cromatografía de gases consiste de una cabeza de inyección a alta temperatura, una columna (o varias de ellas, ya sea en serie o paralelo), y un elemento que mide las concentraciones de los componentes separados del gas. La temperatura de la columna debe ser controlada por un termostato y puede mantenerse constante durante el análisis, o programada de forma que se permita la separación de mezclas con puntos de ebullición más altos.

La muestra entra por un diafragma a la cabeza de inyección (ver figura 2.2) y llevada hasta una columna. En la columna los componentes de la mezcla se separan por partición selectiva o adsorción e, idealmente, se detectan por separado cuando salen. La salida del detector se recoge ya sea en forma analógica o digital, y se obtiene una gráfica contra el tiempo. En ella se aprecian varios picos, cada uno correspondiente a un componente (o componentes no separados) de la mezcla, el área bajo cada uno siendo proporcional a la concentración de cada elemento presente, por lo que el análisis sirve para una identificación cuantitativa además de poder separar los distintos constituyentes. El tiempo que transcurre desde que la muestra entra al sistema hasta que se obtiene un pico máximo en la gráfica se conoce como tiempo de retención. Este tiempo varía con la temperatura, el flujo del gas y otras variables. En la gráfica o cromatograma, los picos o áreas bajo ellos proporcionan información cuantitativa, mientras que los tiempos de retención nos hablan de información cualitativa.

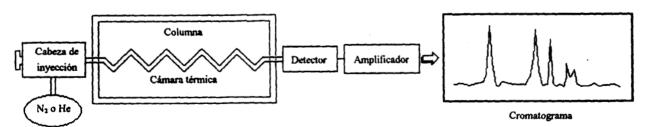


Figura 2.2. Esquema de un cromatógrafo de gases.

El tipo de detector utilizado en el sistema varía de acuerdo a la aplicación, pero en el caso de análisis de componentes y para la mayoría de los trabajos en bioquímica se utilizan ionizadores de flama, detectores de argón o detectores de captura de electrones. El detector de ionización de flama responde a concentraciones tan pequeñas como 10⁻¹¹ moles de cada compuesto de la mezcla, es bastante sensible a compuestos orgánicos y tiene un amplio rango dinámico. Es insensible al agua y otros compuestos inorgánicos. El detector de captura de electrones es utilizado para detectar hidrocarburos clorados y otros compuestos con un alto grado de selectividad.

Como hemos dicho tiene la ventaja de ser un sistema de alta sensibilidad, pero su velocidad de respuesta no es suficiente debido al tiempo que tarda el gas recorriendo las columnas, lo cual lo hace un sistema no apto para el monitoreo clínico, el cual requiere velocidad y continuidad. Además, un aparato de este tipo puede ser bastante complejo y de alto costo.

2.4.2. Espectrometría de Masa

El espectrómetro de masa, en sus diversas configuraciones, es un analizador cuantitativo y cualitativo para la mayoría de los componentes en todo tipo de muestras, ya sean gases líquidos o sólidos, con algunas limitaciones de volatibilidad [10]. Un análisis completo puede obtenerse en un rango que puede ser tan pequeño como algunos milisegundos o tan largo como algunos minutos, con una precisión de ±1.0%. El rango que puede medir va desde algunas partes por millón de un compuesto, hasta concentraciones del 100%. Gracias a éstas y otras características, la espectrometría de masa se convirtió en la primera tecnología clínica que proporcionó un análisis completo y preciso de todos los gases y agentes utilizados en la anestesia, y se convirtió en el estándar contra el cual todos los demás métodos de monitoreo son comparados.

El esquema general de un espectrómetro de masa se muestra en la figura 2.3. El gas a ser analizado se introduce a una cámara de vacío, en la cual se ionizan las moléculas por medio de un bombardeo electrónico a partir de un filamento caliente (existen otros métodos también, como por ejemplo la aplicación de un fuerte campo electrostático, la reacción con otro gas ionizado, el láser, la fotoionización, etc.). La ionización generalmente viene acompañada de una fragmentación parcial de las moléculas. El patrón de fragmentación es constante para una molécula específica bajo las mismas condiciones. La fragmentación complica los cálculos posteriores pero permite distinguir entre isómeros para obtener información sobre la estructura molecular [11].

Los iones obtenidos son entonces enfocados y acelerados por unas rejillas. Posteriormente se separan de acuerdo a su masa a través de un campo eléctrico que induce a los iones a seguir una trayectoria curva de radios proporcionales a sus masas y a sus cargas. Existen varias geometrías para esta etapa, pero la que se muestra es bastante común e ilustrativa. Otros métodos

que existen para la separación incluyen la combinación de campos electrostáticos, campos eléctricos alternantes o rotatorios (filtro de cuadripolo, figura 2.4), radio-frecuencia, etc.

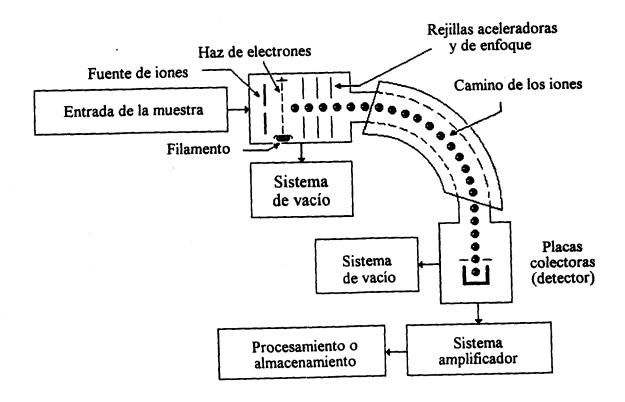


Figura 2.3. Elementos básicos de un espectrómetro de masa.

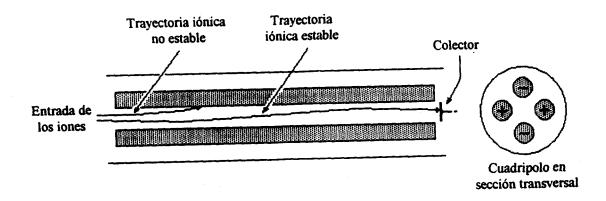


Figura 2.4. Filtro de cuadripolo. Su uso es muy común en sistemas de monitoreo anestésico. Su nombre deriva de las cuatro barras conductoras dispuestas simétricamente. Todos los iones, excepto aquellos de una relación masacarga seleccionada, se salen de trayectoria y se estrellan contra las barras, descargándose. El número de iones que alcanzan el colector al otro extremo es proporcional al porcentaje del gas seleccionado existente en la muestra.

Los iones separados se detectan en las placas colectoras, en un arreglo geométricamente favorable para la captura de iones de una cierta relación masa-carga. El enorme volumen de información que arrojan muchos de los espectrómetros de masa fabricados hoy en día hacen necesario un posterior procesamiento de datos, para aprovechar a fondo la capacidad del aparato.

El costo de un espectrómetro de masa de uso específico para monitoreo de gases clínicos, aunque no tanto como el de aquellos que se utilizan en otro tipo de análisis, es bastante alto debido a sus componentes, principalmente sus cámaras de vacío y los altos campos eléctricos y magnéticos que debe generar. Esto, aunado al gran espacio que ocupa (en años recientes y conforme avanza la tecnología su tamaño se ha reducido), hacen que en ocasiones este aparato se utilice en forma compartida o multiplexada, para aprovecharlo mejor (figura 2.5).

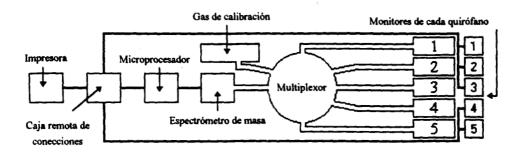


Figura 2.5. Espectrómetro de masa compartido. Un multiplexor continuamente toma muestras de cada paciente y las pasa al espectrómetro. Los resultados se procesan y muestran para cada paciente. La impresora es opcional.

Una desventaja de la espectrometría de masa multiplexada recae en el relativamente largo tiempo de respuesta debido al tiempo de flujo por la tubería del aparato, y debido a ello, la falta de continuidad en el monitoreo durante el muestreo [12]. Sin embargo, y como hemos mencionado, la principal desventaja para cualquier espectrómetro de masa es el costo. No todos los centros médicos pueden tener uno de estos aparatos, ni darles mantenimiento adecuado. Por ejemplo, los espectrómetros de masa compartidos requieren un buen mantenimiento de la plomería y el alambrado de la estación multiplexora central, ya que una falla afectará a todas las salas o pacientes monitoreados.

Debido a esto, se han desarrollado otros sistemas de monitoreo de anestesia bastante útiles y de menor costo, utilizando tecnologías alternativas. Entre ellas se encuentran la espectrometría por efecto Raman, el análisis por infrarrojo, la adsorción piezoeléctrica, la espectroscopía de movilidad de iones y, recientemente, los condensadores de aspiración.

2.4.3. Espectrometría por Radiación Infrarroja

La región del espectro electromagnético comprendida entre 0.7 y 1000 micrómetros de longitud de onda se denomina como el infrarrojo. La radiación por debajo de estas longitudes de onda se denomina región visible, y por encima, microondas (aunque los limites son un poco arbitrarios). La región infrarroja se divide generalmente en tres sub-regiones: la región infrarroja cercana (0.7 a 1.5 micrómetros), la región infrarroja intermedia (1.5 a 20 micrómetros), y la región infrarroja lejana (20 a 1000 micrómetros).

La radiación infrarroja se produce principalmente por la emisión de materiales sólidos y líquidos excitados térmicamente, y por emisión molecular en los gases. La emisión gaseosa de radiación infrarroja difiere de la emisión en sólidos o líquidos puesto que la primera produce un espectro discreto, compuesto de bandas, mientras que la segunda produce un espectro con una distribución energética continua.

La propagación de la radiación infrarroja en un gas, así como en los demás materiales, depende en general de la absorción, la cual varía con la longitud de onda. Las vibraciones y rotaciones moleculares en los gases, relacionadas con la emisión de radiación, también son responsables de la absorción por resonancia. Los gases menores en la atmósfera presentan una pronunciada absorción sobre el espectro infrarrojo. Sin embargo, el nitrógeno y el oxígeno, fundamentales en anestesia, no absorben bien la radiación en esta región.

En la figura 2.6 se muestra un analizador infrarrojo [13]. La detección de la presencia de esta radiación, su distribución y/o cantidad, requiere de técnicas en parte únicas para esta región del espectro. La frecuencia es tal que se pueden utilizar métodos ópticos para captarla, dirigirla y filtrarla. Los elementos ópticos de transmisión, ventanas y lentes, se fabrican de elementos que pueden no ser transparentes para el espectro visible. Por otro lado, la parte más importante de este tipo de aparatos es el detector, el cual puede ser de diferentes tipos, dependiendo de la región a analizar. Para esto se utilizan dispositivos foto-emisores, foto-celdas, foto-conductores, etc. También pueden utilizarse elementos térmicos (termocoplas, bolómetros o celdas pneumáticas), los cuales deben diseñarse específicamente, pero no son tan sensibles y no responden tan rápido como los foto-conductores.

El analizador infrarrojo se basa en el hecho de que gases compuestos, con dos o mas átomos desiguales en una molécula (como el N₂O, el CO₂ y los agentes anestésicos halogenados) presentan una absorción del infrarrojo que es única [10]. En la figura 2.6, el gas entra a una cámara conocida como celda de muestra, mientras una luz infrarroja intermitente (la cual pasa primero por una rueda que gira varios miles de veces por minuto y que tiene filtros especialmente escogidos para el gas a medir) lo ilumina. La luz atraviesa al mismo tiempo un gas sin características de absorción en otra cámara, la celda de referencia. Finalmente, la radiación llega al

detector, en este caso un fotosensor. La cantidad de luz absorbida por el gas muestreado es proporcional a la presión parcial de los gases cuyos patrones de absorción corresponden a las longitudes de onda seleccionadas mediante los filtros en la rueda giratoria. Entre más luz sea detectada, menor es la cantidad de gas presente y viceversa. Los niveles de luz cambiantes son detectados en el fotonsensor, y se transforman en señales eléctricas que son amplificadas y procesadas para obtener la verdadera señal al compararla con la señal obtenida con el gas de referencia. Esta señal puede entonces ser almacenada, procesada y/o desplegada.

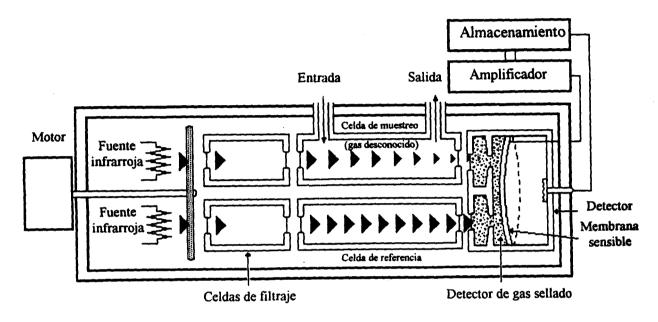


Figura 2.6. Esquema de un analizador de infrarrojo.

Además de la desventaja que tiene este método al no poder medir oxígeno y nitrógeno, se añade la desventaja del costo cuando se trata de medir los agentes anestésicos, ya que en este caso se requieren filtros sumamente selectivos, además de detectores mucho más sensibles, ya que las bandas del espectro de los agentes anestésicos halogenados son relativamente pequeñas y hay sobreposición entre ellas.

2.4.4. Espectrometría por difracción de Raman

Esta forma de espectrometría está basada en el efecto Raman, el cual describe el fenómeno por el cual una luz incidente monocromática (generalmente ultravioleta) se difracta con una longitud de onda diferente (además se observa la luz original refractada, lo que se conoce como difracción Rayleigh, figura 2.7) debido a que al entrar en contacto con un gas, líquido o sólido, las moléculas de éstos absorben la energía, convirtiéndola en modos vibratorios y rotatorios, y reemiten una pequeña porción [14]. La nueva longitud de onda y el número de nuevos haces puede

utilizarse para determinar los componentes de un gas. Descubierto por el fisico hindú C.V. Raman en 1928, a este fenómeno también se le conoce con el nombre de efecto Smekal-Raman, siendo el primero un investigador que hizo algunas predicciones sobre el fenómeno un tiempo antes.

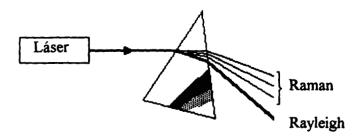


Figura 2.7. Sistema óptico para la observación de un espectro de Raman. La difracción Rayleigh se observa a la misma longitud de onda que el rayo láser monocromático incidente. La difracción Raman tiene una longitud de onda diferente, dependiendo del material sobre el cual incide el rayo láser.

El efecto Raman permite entonces determinar los modos de movimiento molecular, especialmente las vibraciones, y su utilidad para el análisis radica en que las vibraciones son específicas para cada gas en particular, tal como sucede con la espectrometría por infrarrojo. Ambos, el efecto Raman y el espectro infrarrojo, nos proporcionan una descripción parcial del movimiento vibratorio interno de una molécula. Ninguno de los dos métodos nos da información completa, y por análisis, entre los dos se puede inferir nueva y útil información.

En la figura 2.8 se muestra un espectrómetro de efecto Raman [10]. El gas a ser analizado entra en la celda de muestreo, en donde es iluminado con un rayo láser, generalmente de Argón, que se dispersa por el efecto Raman. Una serie de lentes montados en forma paralela a una ventana por donde sale la radiación Raman la juntan y guían a través de un número de filtros que seleccionan las longitudes de onda de los gases a analizar. La luz así tratada es entonces recogida por un detector que determina el número de fotones incidentes. El análisis de la frecuencia permite la identificación de los gases presentes en la muestra.

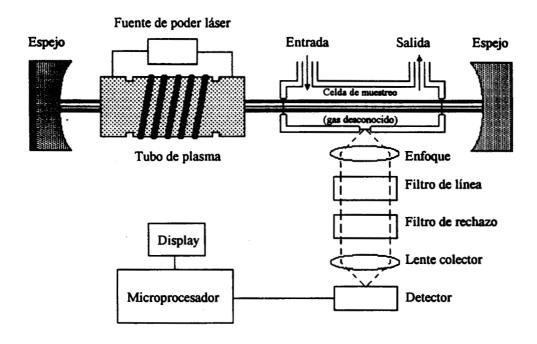


Figura 2.8. Diagrama de un analizador por efecto Raman.

Los espectrómetros Raman, aunque cercanos al nivel de un espectrómetro de masa en cuanto a desempeño, son más pequeños que éste y más baratos. Aún así, la reducción en precio y tamaño no es la suficiente, ya que siguen ocupando mucho espacio y el sistema óptico y los detectores son algo caros. Además, la fuente del láser debe ser cambiada anualmente, y el consumo de potencia de éste es grande.

2.4.5. Análisis Piezoeléctrico

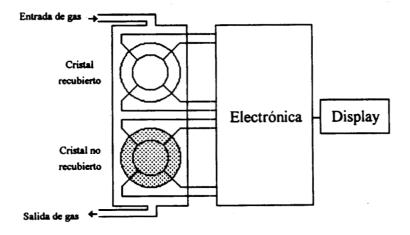


Figura 2.9. Esquema de un analizador piezoeléctrico.

Los gases anestésicos tienen la propiedad de ser altamente solubles en lípidos, y se depositan sobre su superficie por un proceso de adsorción [10]. Un analizador piezoeléctrico (figura 2.9) consiste en dos cristales, generalmente de cuarzo, uno de ellos cubierto con una capa de lípido o lípido-polímero. Mediante un sistema de dos osciladores, uno conectado al cristal recubierto (detector) y otro al no recubierto (referencia), se determina la diferencia entre las frecuencias generadas, la cual es proporcional a la cantidad del anestésico en el gas, el cual hace que la masa del lípido cambie, modificando la frecuencia de resonancia del cristal.

El analizador resultante es pequeño y barato, pero con la desventaja de que el sensor tiene variaciones de acuerdo a la humedad y, aunque detecta la presencia de anestésicos, no puede distinguir entre ellos.

2.4.6. Espectrometría por Movilidad Iónica (IMS)

Esta tecnología nació a finales de los sesentas con el nombre de cromatografía de plasma, el cual no la describía con exactitud, y se introdujo como un método para la detección de concentraciones pequeñas de compuestos orgánicos en el aire y otros gases. El término de espectrometría de movilidad de iones se refiere a los principios, la práctica y la instrumentación para analizar y caracterizar substancias químicas a través de la movilidad de sus iones cuando éstas se encuentran en estado gaseoso [15]. Es una técnica instrumental para la detección y caracterización de vapores. Debido a estas características ha crecido el interés en su desarrollo en el campo del monitoreo de anestesia [16].

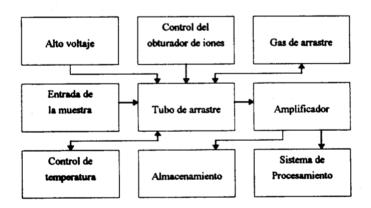


Figura 2.10. Diagrama de bloques de un espectrómetro de movilidad de iones completo.

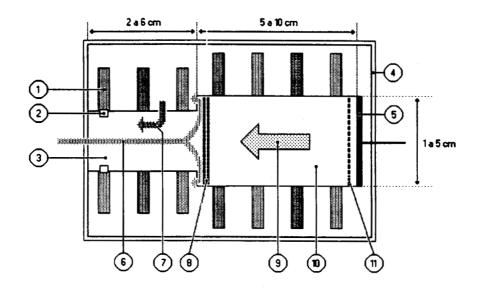


Figura 2.11. Esquema de un tubo de arrastre típico. (1) Anillos. Estos crean el campo eléctrico requerido. Están conectados a un divisor de voltaje y forman un campo eléctrico con gradiente, siendo más intenso dentro del primer anillo al principio del tubo (de alto voltaje) y menor en el de la extrema derecha, a la salida del tubo (de menor potencial). (2) Fuente radioactiva, emisora de partículas \(\beta\). Generalmente está fabricada con Ni-63. (3) Región de ionización. En ella el aire o el gas de relleno es bombardeado con electrones de alta energía para formar iones reactivos, los cuales a su vez crean iones producto al tener colisiones con las moléculas del gas a ser analizado. (4) Cámara térmica. Todo el sistema se encuentra dentro de ella y se mantiene a una cierta temperatura que puede llegar hasta 350℃. Esto reduce cualquier efecto de "memoria" y otros efectos de agrupamiento que puedan degradar el espectro. (5) Detector. Consiste en un disco plano de metal que generalmente se encuentra a un potencial de referencia cero (tierra). Convierte la carga iónica en corriente, la cual puede ser posteriormente amplificada y almacenada o procesada. (6) y (7) Son dos formas diferentes en que puede introducirse el gas a analizar en el tubo. El primer caso se denomina flujo bidireccional (por el contraflujo, explicado en el punto 9). El gas se introduce por la izquierda, y se agota antes de llegar al obturador (ver punto 8). El segundo caso se denomina flujo unidireccional. El gas se introduce al final de la región de ionización y fluye hacia la entrada. Este tipo de introducción del gas tiene la ventaja de hacer al sistema bastante rápido ya que las moléculas que no se ionizan son barridas hacia afuera y no causan colisiones. (8) Obturador. Se trata de dos rejillas con potenciales individuales. Controlan la invección de iones de la región de ionización a la región de arrastre. Esto se logra al controlar la diferencia de potencial entre las rejillas. (9) Gas de arrastre. Es un gas limpio y en contraflujo a los iones el cual mantiene la región de arrastre limpia de impurezas, evitando reacciones indeseables. (10) Región de arrastre. Por ella viajan los iones con ayuda del campo eléctrico producido por los anillos. (11) Malla de apertura. Es una fina malla que aisla al detector de ruido electrónico. Lleva un campo eléctrico de 350 a 600 V/cm y les imparte energía a los iones que la cruzan, para que éstos se impacten posteriormente en el detector.

El proceso se basa en la ionización, como su nombre lo indica. Los vapores a ser analizados se ionizan en una cámara de reacción o ionización mediante una fuente de radiación de alta energía (material radioactivo, láser, spray corona, etc.) y se mide la movilidad de los iones resultantes inmersos en un campo eléctrico. El corazón del sistema, el cual realiza estas acciones, se denomina tubo de arrastre. La electrónica que se requiere para completar el proceso, y su relación con el tubo de arrastre se muestra en la figura 2.10.

En la figura 2.11 se muestra un tubo de arrastre típico. El gas a ser analizado se introduce en la cámara de ionización donde un núcleo radioactivo, generalmente Ni-63, constantemente bombardea con partículas β (electrones de alta energía, 19 keV) el aire u otro gas de transporte que ahí se encuentre. Los iones que se producen por esta radiación (iones reactivos) a su vez tienen colisiones con el gas a ser analizado, produciendo nuevos iones (iones producto). Los iones reactivos pueden tener carga positiva (i.e. si chocan con N₂) o negativa (como ocurre cuando colisionan con O₂).

Posteriormente, el campo eléctrico barre iones de una cierta polaridad (dependiendo del campo seleccionado) hacia la región de arrastre y no permite que los iones de polaridad opuesta salgan de la región de ionización. Las rejillas del obturador se colocan a un mismo potencial en ese momento para que algunos iones puedan entrar a la región de arrastre, y posteriormente se cierra. Los iones que chocan contra el obturador cuando éste está cerrado (las rejillas a diferente potencial) se descargan, dejando de ser iones.

Los electrones que alcanzan a pasar por el obturador son llevados por el campo eléctrico en medio de un gas de arrastre en contraflujo que elimina las impurezas, y si su movilidad es diferente se separan en grupos. Cada grupo tiene una movilidad característica de esos iones en particular. Los iones reactivos generalmente son menos pesados y éstos se adelantan a los demás al tener una mayor movilidad.

Antes de llegar al final del tubo, los iones deben pasar por una malla de apertura, la cual acelera los electrones hacia el detector. Cuando chocan contra este último, los iones le transfieren su carga y se crea una corriente que se traduce en un pico en el espectro de movilidad. El espectro de movilidad es una gráfica de la corriente del detector contra el tiempo que tardan los iones en cruzar la región de arrastre desde que son creados, y contiene información cualitativa y cuantitativa. La diferencia entre picos, es decir, la diferencia de tiempo entre la llegada de cada tipo de iones, es de unos cuantos milisegundos.

La movilidad puede ser determinada a partir de un espectrograma utilizando el tiempo de arrastre, y la siguiente fórmula:

$$v_d = KE = \frac{d}{t}$$

en donde K es la movilidad, la cual expresa la resistencia que presenta el gas de arrastre a que cierto tipo de iones se muevan por él, V_d es la velocidad de arrastre, y E es la intensidad del campo eléctrico. Por otro lado, podemos normalizar la temperatura y la presión bajo las cuales se efectúa la medición y así obtener una movilidad para presión estándar (760 mmHg) y temperatura estándar (273 K), conocida como movilidad reducida K_0 :

$$K_0 = K \frac{273}{T} \frac{760}{P} = \frac{d}{E \cdot t} \frac{273}{T} \frac{760}{P}$$

donde P es la presión atmosférica y T es la temperatura.

Además, la movilidad puede expresarse en función de sus dimensiones y el ambiente en que se encuentra:

$$K = \frac{3q}{16N\Omega} \sqrt{\frac{2\pi (m_i + m_g)}{k' Tm_i m_g}}$$

en donde q es la carga del ión, N es la densidad del gas de arrastre, k' es la constante de Boltzman, T es la temperatura en grados Kelvin, m_i es la masa del ión, m_g es la masa del gas de arrastre y Ω es la sección transversal del ión, determinada por la dimensión molecular, su forma y polarización. Si se mantiene la temperatura y la presión constantes, la movilidad variará únicamente en forma proporcional a la carga, e inversamente proporcional a la sección transversal. Como puede observarse, la movilidad depende de tres parámetros:

- Parámetros operacionales (temperatura, presión, campo eléctrico)
- Parámetros de instrumentación (longitud de la región de arrastre)
- Propiedades de los iones y las moléculas del gas

Por otro lado, la movilidad reducida normaliza los dos primeros parámetros, y en realidad solo depende del último, como se mencionó anteriormente. Ahora veamos en que forma las partículas β (electrones con alta energía) forman estos iones:

Formación de iones positivos

Formación de iones negativos

En gas portador N₂{e⁻

En aire seco $\left\{ e^- + O_2 \rightarrow O_2^- \right\}$

En aire húmedo $\{O_2^+ + n(H_2O) \rightarrow (H_2O)_n O_2^-\}$

Principales procesos

- Ionización por transferencia protónica
 (H₂O)_n (H₃O)⁺ + M → MH⁺ + (H₂O)_{n+1}
- Ionización por transferencia de carga (H₂O)_n NO⁺ + M → M⁺ + NO + n(H₂O)
- Ionización por agrupamiento
 (H₂O)_n NH₄⁺ + M → M(NH₄⁺) + (H₂O)_n
- Ionización por transferencia de carga disociativa
 RX+O₂⁻ → RX⁻ +O₂ → X⁻ + R
- Ionización por intercambio protónico
 O₂⁻ + MH → M⁻ + O₂ · H
- Ionización por agrupamiento
 O₂⁻ + MH → O₂⁻ · (MH)

Los iones más abundantes en el aire como son H⁺, NO⁺ y O₂⁻, denominados iones reactivos, se forman a partir de las moléculas del gas. Pequeñas concentraciones del compuesto a analizar reaccionan con estos iones y liberan electrones, principalmente a través de colisiones, para formar iones producto de la molécula a analizar, M, tales como M⁺, MH⁺, o M⁻ y M⁺O₂⁻. Las moléculas polares, como H₂O y N₂O, son atraídas por estos iones y se forman agrupaciones mayores de la forma (H₂O)_n(N₂O)_m⁺M⁻. Para una muestra de una cierta composición que se ioniza, bajo condiciones dadas de temperatura y presión, los conjuntos iónicos formados alcanzarán un equilibrio de composición y cantidad que es característico. Estos iones pueden separarse y analizarse en un gas por medio de su movilidad iónica, K, la cual es función del tamaño de su sección transversal y de su carga.

Cuando la concentración del gas rebasa un cierto límite, los iones reactivos del aire o gas de relleno se agotan y ya no pueden formar más iones producto, y el IMS ya no responde. Bajo estas condiciones se dice que el IMS se encuentra saturado. En la figura 2.12 se muestran las distintas condiciones que puede adoptar la respuesta del espectrómetro de movilidad iónica en relación con la concentración.

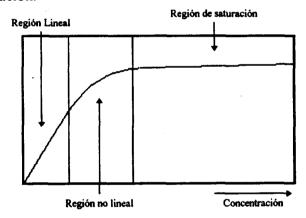


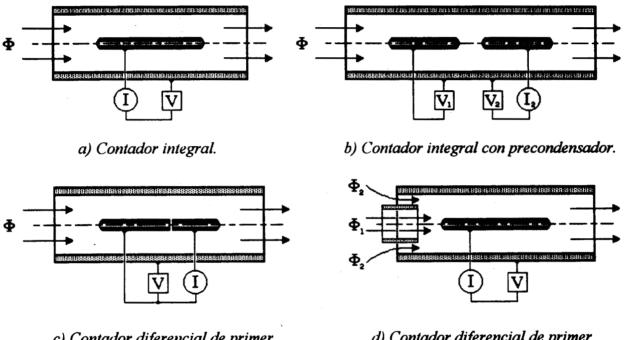
Figura 2.12. Respuesta del IMS en función de la concentración.

Este método proporciona una buena idea de lo que sucede con la movilidad iónica en muestras de gas aunque éstas se encuentren saturadas con agente anestésico u otro químico. Sin embargo, tienen varias desventajas. Una de ellas es que requiere altos voltajes para el obturador, electrodo de referencia y placa colectora, pero la más importante es que no permite un monitoreo continuo ya que debe emplearse el obturador para dejar pasar los iones desde la región de ionización a la región de arrastre.

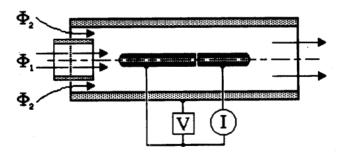
2.5. El método de aspiración

2.5.1. Antecedentes

2.5.1.1. El contador o condensador de aspiración



- c) Contador diferencial de primer orden con electrodo dividido.
- d) Contador diferencial de primer orden con flujo dividido.



e) Contador diferencial de segundo orden.

Figura 2.13. Diagramas de diferentes tipos de contadores de aspiración.

Este aparato utiliza el método de aspiración para medir la movilidad de iones en el aire. Dicho método surgió a finales del siglo XIX [17] y posteriormente fue llevado un paso adelante por investigadores de la talla de J.J. Thompson, Rutherford, Zeleny y McClelland.

Existen varias versiones de este aparato, y algunas de ellas se muestran en la figura 2.13. El principio general para todos los modelos es el mismo: se aplica un voltaje entre las placas de un condensador cilíndrico coaxial, el cual forma un campo eléctrico radial. Este campo actúa sobre los iones que fluyen a través de él en un cierto flujo Φ , y desvía su trayectoria hasta que los iones con una cierta relación carga-movilidad colisionan con el electrodo colector (generalmente el cilindro interior), creando una corriente proporcional a la carga y movilidad de los iones impactados.

2.5.1.2. El condensador de aspiración plano

Utiliza una variante del método de aspiración y fue desarrollado en Finlandia por Puumalainen y Paakanen [18, 19] y se muestra en la figura 2.14. Es más sencillo y más barato, ya que elimina la configuración radial y la substituye por una configuración plana. En este sistema el gas muestreado entra a una cámara en donde se ioniza por medio de una fuente radioactiva y se calienta a temperatura constante. Posteriormente pasa a una cámara en la cual se crea un pequeño campo eléctrico de deflección, del orden de 2 V/cm, producido por una diferencia de potencial entre pares de placas de referencia y colectoras, montadas de forma paralela al flujo en una configuración que asemeja un condensador o capacitor. Las partículas neutrales del gas no se ven afectadas por el campo, mientras que las partículas ionizadas serán desviadas y tendrán una colisión con las placas colectoras. Esto produce una corriente proporcional a la cantidad de iones y a la carga de éstos, la cual es transferida al electrodo cuando entran en contacto.

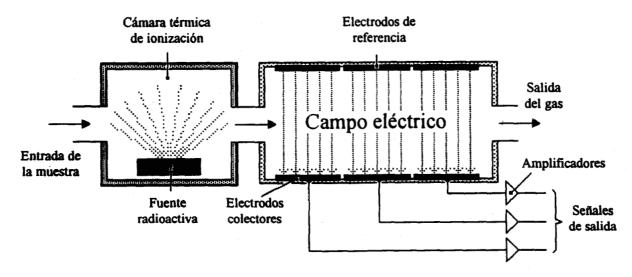


Figura 2.14. El condensador de aspiración plano.

Este sistema es producido comercialmente por Environics Oy en Finlandia, y su principal aplicación es la detección de gases tóxicos para usos industriales y militares.

2.5.2. El condensador de aspiración diferencial de primer orden con barrido de campo

Este sistema desarrollado por Sacristán [2] es una versión simplificada del condensador de aspiración descrito en la sección anterior que utiliza un sistema de barrido de campo, un solo electrodo colector para hacer mediciones, y presenta ciertas ventajas en la detección de la movilidad promedio de los iones en muestras de gas altamente saturado, como es el caso de los agentes anestésicos halogenados, para los cuales fue específicamente diseñado, debido a la eficiencia que presenta en la captura de iones en función de la movilidad, la cual es bastante lineal en la relación corriente-movilidad iónica en la región de interés. Este sistema se describe en detalle en el siguiente capítulo.

VI MÉTODOS

3.1. El condensador de aspiración diferencial de primer orden con barrido de campo

3.1.1. Descripción general

En este condensador de aspiración propuesto por Sacristán [2], se utiliza un único electrodo colector para hacer mediciones. Un esquema de esta configuración se muestra en la figura 3.1. En este caso tenemos un solo electrodo de referencia y dos o mas electrodos independientes, el primero conocido como electrodo frontal o precolector y los demás como electrodos colectores. El gas a ser analizado entra en una cámara con temperatura controlada, en la cual es bombardeado con una radiación de una fuente radioactiva de Americio 241 (partículas alfa). El gas así ionizado pasa a una cámara de detección a una cierta velocidad. Debido a que el campo eléctrico se encuentra de forma perpendicular al flujo, los iones son barridos hacia las placas colectoras en función de su movilidad. Para medir los iones positivos se utiliza un campo eléctrico dirigido de la placa de referencia a las colectoras. Para medir iones negativos simplemente se invierte el campo manipulando los potenciales en las placas.

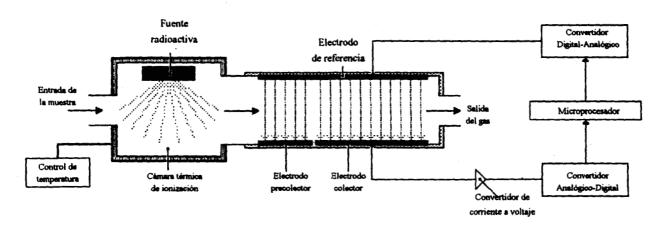


Figura 3.1. El condensador de aspiración diferencial de primer orden.

Utilizando un sensor de este tipo, se han efectuado estudios sobre los agentes anestésicos halogenados [2, 20], obteniendo curvas de voltaje (o corriente) de colector contra voltaje de placa de referencia (variado utilizando un microprocesador y un convertidor digital-analógico). La técnica que se determinó era adecuada en ese momento consistió en variar el voltaje entre electrodos de -10 a 10 volts en 64 puntos discretos, obteniendo una curva como la que se muestra en la figura 3.2. Después de la medición de cada uno de los puntos, se debe permitir un tiempo para que la corriente de colector se estabilice.

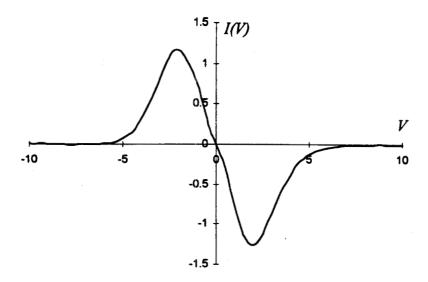


Figura 3.2. Gráfica obtenida con un condensador de aspiración en respuesta a la movilidad de iones para un gas anestésico (halotano al 0.2%) en un gas portador 50% O2 / 50% N2O

El estudio permitió demostrar que con el sistema se pueden obtener curvas diferentes para cada uno de los agentes anestésicos y sus distintas concentraciones en distintas mezclas de gas portador, a pesar de la saturación, prestándose perfectamente para la identificación y cuantificación de éstos.

Los parámetros que se encontró afectan las mediciones son:

- Concentración del VHA: A mayor concentración, hay menor movilidad. Aunque se conserva la cantidad de iones, el tamaño de éstos aumenta. Este efecto es mas notable en los iones negativos.
- Concentración de los elementos del gas portador: Se encontró que al aumentar el N₂O se reduce la movilidad. Además, un aumento de H₂O y CO₂ tiene el efecto de aumentar la resolución para iones negativos.
- Temperatura: A mayor temperatura, mayor movilidad. La relación no es lineal.
- Tasa de flujo del gas a analizar: A mayor flujo, mayor corriente iónica.
- Voltaje aplicado: A voltajes pequeños se pueden detectar mejor (con mayor resolución) las movilidades altas, y a voltajes grandes se detectan mejor las movilidades bajas.

Debido a lo anterior se descubrió que la corriente de los iones negativos es la más adecuada para medir la concentración del agente anestésico en uso, ya que la movilidad de estos iones es más sensible a la concentración, sobre todo para concentraciones bajas. La corriente de los iones positivos, por otro lado, es más adecuada para determinar que agente está en uso.

3.1.2. Funcionamiento teórico

El primer electrodo, electrodo frontal o precolector captura los iones de alta movilidad y limita por tanto el rango de iones que pueden caer en el segundo electrodo. Esta configuración se denomina condensador diferencial de primer orden, y la corriente medida está dada por la integral ponderada de la densidad de movilidad iónica sobre un rango de movilidades definido. Esta función de ponderación que se denomina como función G (debido a la forma de la ecuación que presenta la forma de las funciones que tienen como solución una función de Green) es diferente para cada condensador de aspiración y depende de su geometría, el flujo del gas y el voltaje aplicado. Para una geometría y un flujo dados se puede modificar el rango de movilidades iónicas analizado modificando únicamente el campo eléctrico aplicado. En el sistema propuesto se utiliza una computadora que con precisión y rapidez realiza un barrido del campo eléctrico del condensador y permite la realización de mediciones de diferentes secciones del espectro de movilidad iónica.

En el método de aspiración tradicional se tiene la desventaja de una pobre resolución puesto que, como se ha mencionado, se tiene una medición integral sobre un rango de movilidades. La principal diferencia y el componente central de este método es que se realizan mediante un barrido del campo eléctrico múltiples mediciones. Esto es análogo a la metodología empleada para la tomografía axial computarizada: Los rayos X no tienen ninguna resolución en profundidad, pero haciendo diversas mediciones a diferentes ángulos, la información tridimensional puede reconstruirse aplicando una transformación matemática inversa. En nuestro caso, se realizan varias mediciones integrales en una dimensión con el fin de reconstruir una curva bidimensional, pero en lugar de cambiar un ángulo se varía el campo eléctrico.

Con este barrido se obtiene una curva de corriente contra voltaje (como la que se muestra en la figura 3.2). Esta curva contiene toda la información del espectro de movilidad iónica, y aplicando una transformación inversa, puede reconstruirse ese espectro.

3.1.3. Descripción matemática [21]

La descripción matemática teórica del método de aspiración fué desarrollada por H. F. Tammet en 1967 [5]. El condensador diferencial de primer orden básico consiste en dos electrodos diferentes, un electrodo frontal o precolector, y un electrodo colector con el cual se realizan las mediciones (figura 3.3).

Un flujo de gas previamente ionizado fluye entre los electrodos del condensador y una placa de referencia que se encuentran dispuestas en una configuración de condensador o capacitor. Los iones de una polaridad dada son desviados por el campo hacia los electrodos mediante el campo eléctrico E que se forma entre las placas, de forma perpendicular al flujo. La

componente vertical de la trayectoria del ión, v_d , paralela al campo, es la velocidad de arrastre del ion debida a éste. La componente horizontal, v_f , paralela al flujo, es la velocidad del ion debida al frente laminar de flujo dentro del condensador. El flujo debe mantenerse de forma laminar, puesto que de otra forma la trayectoria del ion no puede ser determinada y los iones no pueden ser separados de acuerdo a su tamaño. El frente laminar es parabólico con una velocidad de flujo máxima en el centro del canal y cercana a cero en las paredes.

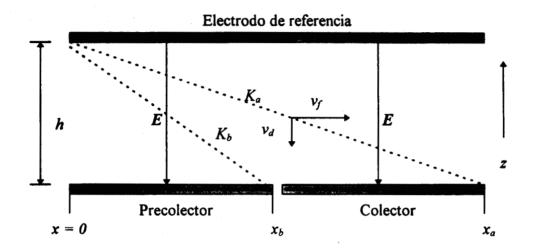


Figura 3.3. Diagrama de un condensador diferencial de primer orden. Las trayectorias de los iones que viajan a través del condensador son desviadas por el campo eléctrico E. El electrodo frontal (precolector) captura todo ion con movilidad K>K_b. El electrodo colector captura todos aquellos iones con una movilidad K>K_a excepto aquellos que fueron capturados por el precolector.

Por otro lado, solo nos interesa la trayectoria media para un ion de una cierta movilidad. Para este análisis se puede simplificar el modelo considerando la velocidad de flujo promedio, donde f es la tasa de flujo y s es el área de la sección transversal del canal del condensador [22]:

$$\overline{v_f} = \frac{f}{s}$$

Con esta simplificación, puede verse gráficamente en la figura 3.3 que todo ión positivo con movilidad mayor o igual a K_b se desviará lo suficiente como para ser recogido por el precolector ya que aún los iones más alejados de los electrodos a la entrada del detector, a una distancia h sobre ellos, pueden desviarse de esta manera. El campo eléctrico se define como:

$$E = \frac{V}{h}$$

Si trazamos una línea desde la entrada de la cámara desde una altura h a una distancia x=0 hasta la orilla lejama del precolector (x=b), podemos darnos cuenta de ello. En este caso, los iones con movilidades mayores a cierto límite, el cual llamaremos K_b , cumplirán este requisito (entre mayor sea la movilidad es más fácil que un ión se desvíe por el campo). Podemos hacer lo mismo para la otra placa, tomando ahora x=a, y ahora los iones que pueden ser recogidos por la placa colectora y/o el electrodo precolector serán aquellos con una movilidad mayor o igual a un límite que denominaremos K_a . Siguiendo este razonamiento se puede determinar una función que describe la eficiencia de captura de iones en cada electrodo, la cual se denomina como función G.

Al barrer el voltaje del condensador se produce una curva de corriente contra voltaje I(V) en el electrodo de medición (el colector). Esta curva es producida como una transformación del espectro de movilidad iónica de la muestra de gas. La transformación descrita por Tammet [5] se define como:

$$I(V) = \int fG(V, K, f)D(K)dK$$

En la ecuación anterior $G(V,K_t)$ es la función G del electrodo de medición que describe su eficiencia de captura iónica, y es una función del voltaje de deflección V aplicado al condensador, la movilidad iónica K, y la tasa de flujo del gas portador f. D(K) es la distribución de movilidad iónica o función de densidad de la muestra de gas ionizado, y es igual a la densidad de carga específica de los iones con una movilidad K.

Para el precolector, que se extiende desde x=0 hasta x=b, tendremos:

$$G_b(K, V, f) = \begin{cases} \frac{K}{K_b} & \text{si } K_b \ge K \ge 0\\ 1 & \text{si } K \ge K_b \end{cases}$$

y para el precolector y colector juntos tendremos:

$$G_a(K, V, f) = \begin{cases} \frac{K}{K_a} & \text{si } K_a \ge K \ge 0\\ 1 & \text{si } K \ge K_a \end{cases}$$

y tomando en cuenta que b < a y que $K_b > K_a$, podemos calcular la función G para el colector solo:

$$G_{ab}(K,V,f) = G_a(K,V,f) - G_b(K,V,f) = \begin{cases} \frac{K}{K_a} - \frac{K}{K_b} & \text{si } K_a \ge K \ge 0\\ 1 - \frac{K}{K_b} & \text{si } K_b \ge K \ge 0\\ 0 & \text{si } K \ge K_b \end{cases}$$

y por ésto es que se conoce como condensador diferencial. En la figura 3.4 se muestra una representación gráfica de los cálculos anteriores.

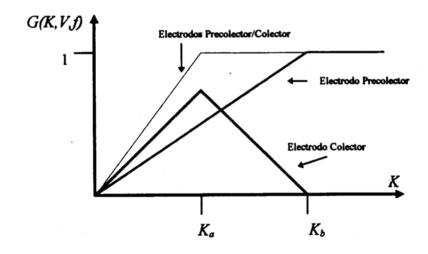


Figura 3.4. Cálculo gráfico de la función G para el electrodo colector.

Si tuvieramos otra configuración con más electrodos o diferentes campos eléctricos, solo debemos seguir el mismo procedimiento e incluir los efectos indicados.

Para todas las ecuaciones anteriores:

$$K_a = \frac{h v_f}{x_a E} \quad \text{y} \quad K_b = \frac{h v_f}{x_b E}$$

Puede entonces observarse que la función G depende de la geometría del detector (la distancia y dimensiones de los electrodos x, x_a y x_b , la distancia entre placas h, y la sección transversal del canal s), la tasa de flujo del gas f (que determina la velocidad promedio v_f) y el potencial de deflección aplicado V (el cual causa el campo eléctrico E). Si consideramos que las dimensiones del condensador y la tasa de flujo son constantes, podemos entonces definir las constantes A y B como:

$$A = \frac{h^2 \overline{v_f}}{x_a} \quad y \quad B = \frac{h^2 \overline{v_f}}{x_b}$$

y entonces podemos reescribir la función G de un condensador de aspiración diferencial de primer orden como:

$$G(K,V) = \begin{cases} \frac{KV}{A} - \frac{KV}{B} & \text{si } A \ge KV \ge 0\\ 1 - \frac{KV}{B} & \text{si } B \ge KV \ge A\\ 0 & \text{si } KV \ge B \end{cases}$$

Esta ecuación define dos hipérbolas que limitan tres áreas distintas, como puede observarse en la figura 3.5.

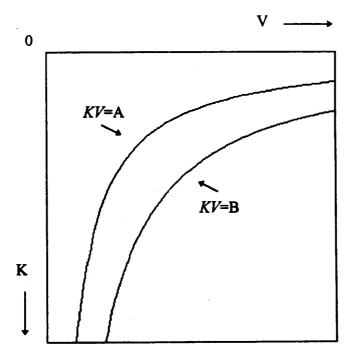


Figura 3.5. Representación de las tres áreas definidas por hipérbolas en una función G.

El área entre los ejes y la hipérbola interior, definida por KV=A, tiene una pendiente positiva. La segunda área, entre la primera hipérbola y la segunda, definida por KV=B, posee una pendiente negativa. Finalmente, la tercera área, desde la segunda hipérbola hacia afuera, es plana e igual a cero. En la figura 3.6. se muestra una representación tridimensional de la función G.

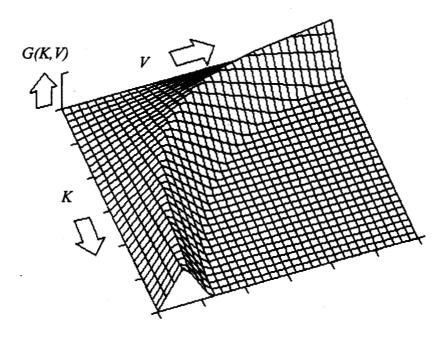


Figura 3.6. Representación tridimensional de una función G para el electrodo de medición de un condensador de aspiración. G(K, V) es la eficiencia de captura del colector y es función del voltaje V, la movilidad iónica K, y los parámetros dimensionales y operacionales del condensador. Como puede apreciarse, existe una relación hiperbólica entre los dominios del voltaje y la movilidad.

El máximo de la función G puede encontrarse fácilmente y puede verse gráficamente en la figura 4.4. Este ocurre cuando KV=A. En este caso,

$$G(K,V)_{\text{max}} = 1 - \frac{A}{B} = 1 - \frac{x_b}{x_a}$$

Dado que $x_b < x_a$ y ambas son distancias positivas y reales, el valor máximo de la función es siempre positivo y menor a la unidad, y solo está determinado por la longitud de las placas precolectora y colectora.

Desde un punto de vista discreto, la función G puede apreciarse como dos familias de triángulos, una para cada una de las variables $(V \ y \ K)$. Estas se encuentran integradas de forma que un espaciado uniforme en una de las variables produce un espaciado hiperbólico en los picos de los triángulos para la otra variable:

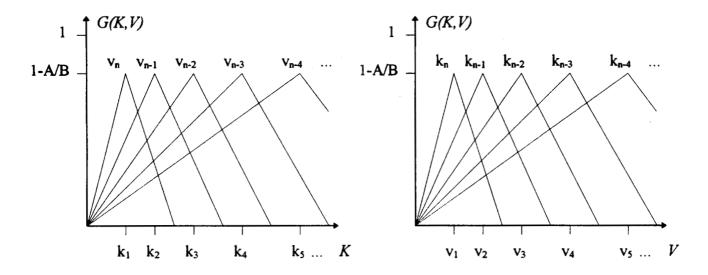


Figura 3.7. La función G vista como dos familias simétricas de triángulos. La forma de los triángulos es una función de la dimensión de los electrodos del condensador. Las dos variables independientes mantienen una relación hiperbólica.

3.1.4. La transformada discreta de Tammet

Se desea utilizar al condensador de aspiración con barrido de campo como un espectrómetro de movilidad iónica. Para ello, es necesario poder reconstruir la función de densidad de movilidad iónica D(K) a partir de la curva I(V) obtenida con el condensador, es decir, la función inversa de la transformada propuesta por Tammet:

$$I(V) = \int fG(V, K, f)D(K)dK$$

Como puede deducirse de esta ecuación, cada punto de la curva de corriente se obtiene por integración a partir de una función G, la cual describe la información completa de la densidad de movilidad iónica en cada punto, pero vista desde una perspectiva diferente. De nuevo, utilizando la analogía con la tomografía axial computarizada, podemos considerar a la transformada de Tammet como una proyección y una transformada inversa puede considerarse como una reconstrucción.

Como es el caso para otras transformadas, la ecuación de Tammet requiere de la evaluación de las integrales asociadas, y puede ser descrita analíticamente únicamente si las expresiones involucradas son relativamente simples. Mas aún, las funciones de distribución de movilidad iónica no pueden ser descritas de manera analítica dado que son señales físicas y generalmente son obtenidas de forma discreta por un espectrómetro de movilidad iónica o algún equipo similar, y deben manipularse en forma no continua. Por otro lado, la función I(V) también se obtiene de forma discreta ya que los voltajes suministrados al sistema son controlados por una computadora a través de un convertidor digital-analógico.

Esto significa que se requiere una técnica adecuada para el muestreo y una representación discreta de la ecuación de Tammet. Esta discretización permite una solución simple y eficiente desde el punto de vista computacional.

La transformada directa de Tammet en su versión discreta (DDTT) para un condensador de aspiración con una tasa de flujo de gas constante f = f puede aproximarse mediante una sumatoria de Riemann [23]:

$$i(v_{j}) = f \sum_{i=0}^{n} \Delta k_{i} G(k_{i}, v_{j}) D(k_{j})$$

donde $\Delta k_i = (k_i - k_{i-1})$. Entonces podemos escribir la ecuación para la DDTT en notación matricial:

$$i = fGd$$

y si la matriz G es cuadrada y no singular, podemos definir la transformada inversa de Tammet discreta (DITT) como:

$$fd = G^{-1}i$$

en donde i es un vector que contiene los elementos de la curva característica $I(v_i)$,

$$\mathbf{i} = \begin{bmatrix} I(\mathbf{v}_1) \\ I(\mathbf{v}_2) \\ \vdots \\ I(\mathbf{v}_m) \end{bmatrix}$$

d es un vector que contiene los elementos de la función de distribución de movilidad iónica $D(k_i)$,

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} D(\mathbf{k}_1) \\ D(\mathbf{k}_2) \\ \vdots \\ D(\mathbf{k}_n) \end{bmatrix}$$

y G es una matriz cuadrada no singular que contiene los elementos $\Delta k_i G(k_i, v_i)$,

$$G = \begin{bmatrix} (k_1 - k_0)G(k_1, v_1) & (k_2 - k_1)G(k_2, v_1) & \cdots & (k_n - k_{n-1})G(k_n, v_1) \\ (k_1 - k_0)G(k_1, v_2) & (k_2 - k_1)G(k_2, v_2) & \cdots & (k_n - k_{n-1})G(k_n, v_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (k_1 - k_0)G(k_1, v_m) & (k_2 - k_1)G(k_2, v_m) & \cdots & (k_n - k_{n-1})G(k_n, v_m) \end{bmatrix}$$

donde.

$$\forall i = 0, ..., n: k_i = \frac{A}{v_i} \quad y \quad v_i > 0$$

Esta última condición, aunque no necesaria para una transformación directa, es esencial para la transformada inversa ya que preserva la relación hiperbólica entre los dominios del voltaje y la movilidad iónica y determina el hecho de que la matriz G posea un determinante diferente de cero y que por tanto exista una solución inversa única. Si lo que se desea es obtener una función de distribución de movilidad iónica $D(k_i)$ uniformemente espaciada utilizando la DITT para la curva de corriente $I(v_j)$ adquirida por un condensador de aspiración, entonces se requiere utilizar un esquema de muestreo apropiado espaciado hiperbólicamente en el dominio del voltaje. De forma más general, al aplicar la restricción descrita se puede designar la estrategia de muestreo requerida para obtener un rango y resolución deseados en cualquiera de los dominios, dadas las dimensiones del condensador y la tasa de flujo de gas empleada.

Otro detalle que hacer notar para la fórmula anterior es que G necesita ser cuadrada para determinar una inversa, es decir, m=n, pero en el caso de una transformada directa este requisito no es indispensable. Esto significa que, a pesar de que se pueden obtener transformadas directas con un número de puntos diferentes en ambos dominios (movilidad y voltaje), deben tener el mismo número de puntos en ambos dominios si se requiere una transformación inversa.

3.2. Relación experimental entre el condensador de aspiración y el espectrógafo IMS

La matemática propuesta para el condensador de aspiración y la relación que ésta mantiene entre los dominios de la densidad de movilidad iónica (provisto por la espectrometría de movilidad iónica) y la densidad de corriente (obtenido mediante el condensador de aspiración) sugiere la obtención de una función de eficiencia de captura que relacione ambos sistemas a partir de datos experimentales. A partir de la expresión matricial-vectorial de la función de Tammet, podemos re-definir:

$$I = fG'D$$

donde I se define como el conjunto de p vectores del espacio solución intensidad de corriente i :

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} \mathbf{i}_1 & \mathbf{i}_2 & \cdots & \mathbf{i}_p \end{bmatrix}, \text{ donde el i-ésimo vector está determinado por } \mathbf{i}_i = \begin{bmatrix} I_i(\mathbf{v}_1) \\ I_i(\mathbf{v}_2) \\ \vdots \\ I_i(\mathbf{v}_m) \end{bmatrix}$$

y de la misma manera \mathbf{D} se define como el conjunto de q vectores de densidad de movilidad iónica correspondiente:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_1 \ \mathbf{d}_2 \ \cdots \ \mathbf{d}_q \end{bmatrix}, \text{ donde el j-ésimo vector está dado por } \mathbf{d}_j = \begin{bmatrix} D_j(\mathbf{k}_1) \\ D_j(\mathbf{k}_2) \\ \vdots \\ D_j(\mathbf{k}_n) \end{bmatrix}$$

Con estas definiciones, y si m=n=p=q, podemos encontrar la relación G' mediante

$$\mathbf{G'} = \frac{1}{\mathbf{f}} \mathbf{I} \mathbf{D}^{-1}$$

Obviamente existen varias restricciones para este procedimiento. El primero, m=n=p=q, significa que necesitamos tener un número m de densidades de movilidad iónica de m muestras cada una, y sus m correspondientes densidades de corriente (correspondientes entre sí) para poder obtener una relación cuadrada de $m \times m$. Si queremos una buena resolución para la función de relación, debemos tener una buena e igual resolución en movilidad y voltaje, además de una grande e igual cantidad de ejemplares $\mathbf{d} - \mathbf{i}$. Ya que éstos se obtienen mediante aparatos con diferencias bien definidas y bajo diferentes condiciones, la matriz de relación \mathbf{G} ' reflejará la relación implícita entre el condensador de aspiración y el espectrómetro de movilidad iónica utilizado. Entonces, la matriz de relación \mathbf{G} ' asi obtenida no es la misma ni tiene el mismo significado que aquella definida anteriormente como matriz \mathbf{G} , pero juega el mismo papel que ésta al contener la información que determina la relación entre dos espacios diferentes, el espacio de densidad de movilidad iónica y el de densidad de corriente iónica, con la particularidad de que la matriz de relación \mathbf{G} ' incluye además la relación entre dos sistemas diferentes.

3.3. Evaluación de las características de la transformada de Tammet

La importancia de conocer las características y la relación que tiene la transformada de Tammet con cada una de las variables que en ella influyen no puede enfatizarse demasiado. Es vital para el diseño de un nuevo sistema tomar en cuenta todos los aspectos que afecten su salida, así como aquellos que permitan reconstruir las características fisicas y químicas del gas muestreado con la mayor exactitud y conocimiento de lo que éstas significan.

3.3.1. Linealidad

La ecuación de Tammet descrita, ya sea en su forma continua o discreta, sugiere linealidad dado que utiliza únicamente operaciones lineales. Para ilustrar esta característica se utilizó la definición clásica para la linealidad, es decir, si denominamos al operador transformada de transformada de

$$a\mathsf{T}(f(f,K,V))+b\mathsf{T}(g(f,K,V))=\mathsf{T}(af(f,K,V)+bg(f,K,V))$$

En este caso es necesario hacer notar que esta propiedad sería dificil de comprobar experimentalmente ya que dos gases en un sistema real dificilmente generarían a la salida una respuesta proporcional a la suma de las respuestas individuales. Esto se debe a la respuesta fisico-química del condensador, en donde los gases son primero ionizados y posteriormente forman macro-moléculas iónicas o agrupaciones moleculares. La ecuación de Tammet no describe el proceso de ionización, sino únicamente la captura de los iones ya formados. Si se mezclan dos o mas gases, reaccionarán entre sí y/o formarán agrupaciones diferentes a las que se presentarían si se experimenta con cada gas por separado.

3.3.2. Respuesta al impulso

La respuesta al impulso de un sistema es muy importante ya que pone de manifiesto las características de transferencia de éste. En el caso del condensador de aspiración, y dada la forma en que se ha definido la transformada de Tammet, la respuesta al impulso evidenciaría la forma de la función G. Para el caso discreto, se ha definido al vector de entrada como un vector que contiene valores nulos en todas las posiciones excepto en aquella donde se encuentra el impulso, en donde adquiere un valor de uno (impulso unitario).

3.3.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada

Con el fin de evaluar el efecto que tiene cada uno de los parámetros del condensador de aspiración, tanto fijos (tamaño de las placas precolectora y colectora, altura y ancho de la celda de muestreo) como variables (flujo del gas, cantidad de iones presentes en éste, su movilidad y número de especies) se asignaron diferentes valores a cada uno de estos parámetros y se evaluó su respuesta en una simulación. De nuevo se utilizaron entradas de forma gaussiana, siendo éstas útiles para reflejar las características simuladas (por ejemplo, la cantidad de iones presente se simula afectando la altura de la gaussiana, la movilidad modificando la media, y la variedad de especies iónicas presentes al cambiar la desviación estándar). Los parámetros básicos de la función de entrada gaussiana utilizados son: media=1 cm²/v·seg, σ=0.2, amplitud=10, con una resolución de 100 muestras entre K=0.5 cm²/v·seg y K=1.5 cm²/v·seg. Los parámetros básicos del condensador de aspiración utilizados son: tamaño del precolector x_b=0.15 cm, tamaño del precolector y colector juntos x_a=0.25 cm, altura de la celda h=0.04 cm, ancho de la celda w=0.6 cm y flujo del gas f=0.5 l/min. La respuesta se obtuvo para 100 puntos uniformemente espaciados ente 0 y 6 volts.

3.3.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud)

Para estudiar el efecto de estas variaciones se crearon 10 curvas gaussianas de entrada con las características mencionadas, variando la amplitud de éstas desde 1 hasta 10.

3.3.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento)

Para evaluar el efecto de estas variaciones se utilizaron 10 gaussianas de entrada con las características mencionadas, variando la media de éstas desde 0.6 hasta 1.4 cm²/v·seg.

3.3.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar)

Para determinar el efecto de estos cambios se emplearon 10 gaussianas de entrada con las características mencionadas y desviación estándar desde 0.02 hasta 0.2 cm²/v·seg.

3.3.3.4. Variaciones en el flujo

Para estudiar el efecto de estas variaciones se empleó una gaussiana de entrada con las características mencionadas, y se varió el flujo desde 0.1 hasta 1 l/min.

3.3.3.5. Variaciones en la placa precolectora

Para evaluar el efecto de estas variaciones se utilizó una gaussiana de entrada con las características mencionadas, y se varió la longitud de la placa precolectora entre 0.04 y 0.22 cm.

3.3.3.6. Variaciones en la placa colectora

Para determinar el efecto de estas variaciones se creó una gaussiana de entrada con las características mencionadas, y se varió la longitud (x_a-x_b) entre 0.17 y 0.35 cm.

3.3.3.7. Variaciones en la altura de la celda

Para conocer el efecto de estas variaciones se empleó una gaussiana de entrada con las características mencionadas, y se varió la altura desde 0.01 hasta 0.1 cm.

3.3.3.8. Variaciones en el ancho de la celda

Para estudiar el efecto de estas variaciones se utilizó una gaussiana de entrada con las características mencionadas, y se varió el ancho entre 0.1 y 1 cm.

3.3.4. Respuesta en presencia de ruido

Para evaluar el efecto del ruido aditivo afectando una señal de densidad de movilidad iónica sobre la transformada directa de Tammet, se utilizó una gaussiana con media=1 cm²/v·seg, σ =0.15, amplitud=10, y una resolución de 100 muestras entre K=0.5 cm²/v·seg y K=1.5 cm²/v·seg. Los parámetros básicos del condensador de aspiración utilizados son: tamaño del precolector x_b =0.15 cm, tamaño del precolector y colector juntos x_a =0.25 cm, altura de la celda h=0.04 cm, ancho de la celda w=0.6 cm y flujo del gas f=0.5 l/min. La respuesta se obtuvo para 100 puntos uniformemente espaciados ente 0 y 6 volts. El ruido aditivo utilizado es una senoide con amplitud pico de 10 (o 100% del máximo de la señal original) y un período de $2\pi\Delta K$, donde ΔK =(1.5-0.5)/(100-1) es el intervalo entre muestras. Se sometieron entonces las señales original y contaminada a una DDTT y se compararon las salidas.

Para conocer el efecto del ruido en el proceso de transformación inversa, se utilizó la DDTT anterior (procedente de la señal sin ruido) y se contaminó con ruido aditivo senoidal de las mismas características, pero con amplitud pico correspondiente a 0.1% del valor máximo de la transformada directa. Se hizo entonces la transformada inversa y se comparó con la señal original.

Debido a la naturaleza del comportamiento del ruido bajo estas condiciones, se hicieron pruebas con la señal de ruido contaminando la señal de densidad de corriente iónica en diversos intervalos.

3.4. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales

3.4.1. La base de datos de densidades de movilidad iónica

La base de datos de densidades de movilidad iónica fué obtenida por Sacristán [2] en el departamento de física de la Universidad Tecnológica de Tampere en Finlandia, utilizando un espectrómetro de movilidad iónica con las características descritas en la tabla 3.1. Consta de 31 muestras de 300 puntos cada una, entre 0 y 30 segundos, con resolución de 0.1 segundos. Utilizando la relación K=d²/Et pueden obtenerse de estos datos 159 puntos efectivos entre 0.53 y 1.5 cm²/v·seg. Existen muestras para iones negativos y positivos de halotano, isofluorano y enfluorano, en diversos porcentajes (trazas, 0.5%, 1%, 3% y 5%, además de 7% para iones positivos de enfluorano) en un gas portador compuesto por 50% O₂ y 50% N₂O.

Fuente de Ionización	Am ²⁴¹ 348μCi
Longitud del tubo de arrastre	6 cm
Temperatura de operación	37°C
Campo Eléctrico	±506.3 V/cm

Tabla 3.1. Características del espectrómetro de movilidad iónica.

3.4.2. La base de datos de densidades corriente iónica

La base de datos de densidades de corriente iónica fué obtenida por Sacristán y Rosenblatt [6] en la Escuela de Medicina de Massachusetts en Worcester, mediante un condensador de aspiración prototipo cuyas características se resumen en la tabla 3.2. Consta de 278 señales de 64 puntos cada una, incluyendo iones negativos y positivos en cada muestra, para halotano, isofluorano, enfluorano, sevofluorano y desfluorano, cada uno en diversos porcentajes (desde 0.2% hasta 5% para halotano, isofluorano y sevofluorano, hasta 7% para enfluorano y hasta 18% para desfluorano). Todos los gases se midieron para tres gases portadores diferentes (25%O₂/75%N₂O, 50%O₂/50%N₂O y 75%O₂/25%N₂O) y se repitieron todas las adquisiciones durante tres o cuatro ocasiones. Cabe mencionar que en general las adquisiciones realizadas en días diferentes no son consistentes entre sí, por lo que puede suponerse que se obtuvieron bajo condiciones diferentes. Además, algunas curvas presentan deformaciones claramente observables. Se utilizaron en esta tesis únicamente los datos correspondientes a una concentración de gas portador de 50%O₂/50%N₂O (ya que corresponden a los datos obtenidos por el IMS) y

pertenecientes al segundo día de muestreo (ya que contienen el menor número de deformaciones observables).

Fuente de Ionización	Am ²⁴¹ 128μCi
Barrido de voltaje	-10 a 10 volts en 64 puntos
Campo Eléctrico	±250 V/cm
Electrodo Precolector	0.15 cm
Electrodo Colector	0.25 cm
Altura de la celda	0.04 cm
Ancho de la celda	0.6 cm
Temperatura de operación	37°C
Flujo de gas	500 ml/min

Tabla 3.2. Características del condensador de aspiración.

3.4.3. Transformadas directas experimentales

Se realizaron transformadas directas de Tammet con los datos experimentales descritos en la sección 3.4.1 (iones negativos y positivos de halotano, isofluorano y enfluorano) utilizando 100 puntos uniformemente espaciados entre 0 y 10 volts. Posteriormente se realizaron las mismas transformadas con menor resolución, 33 puntos entre 0 y 10 volts, y se compararon con los datos descritos en la sección 3.4.2, los cuales se obtuvieron con las mismas características. Se utilizaron los datos correspondientes al condensador de aspiración resumidos en la tabla 3.2 para obtener las transformadas. Por otro lado, se realizó también una comparación de las derivadas de cada conjunto de señales.

3.4.4. Transformadas inversas experimentales

3.4.4.1. La función G inversa

Para estudiar la función G inversa (es decir, la función que se utiliza al obtener la transformada inversa discreta de Tammet) se produjo primero una función G uniformemente espaciada en el dominio de la movilidad e hiperbólicamente espaciada en el dominio del voltaje mediante las siguientes características de un condensador de aspiración: tamaño del precolector x_b =0.15 cm, tamaño del precolector y colector juntos x_a =0.25 cm, altura de la celda h=0.04 cm, ancho de la celda w=0.6 cm y flujo del gas f=0.5 l/min. La resolución utilizada es de 33 por 33 muestras. Posteriormente se calculó la inversa. El proceso se repitió para una función G hiperbólicamente espaciada en movilidad y uniformemente espaciada en voltaje.

3.4.4.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido

Dado que la base de datos de densidades de corriente iónica fue obtenida con muestras uniformemente espaciadas en el dominio del voltaje y se desea obtener un espectro de movilidad iónica uniformemente espaciado, se requiere modificarla para obtener un espaciado hiperbólico a fin de hacer posible la obtención de una función inversa. Para esta tesis se han propuesto básicamente dos métodos de interpolación de datos: interpolación polinomial (regresión polinomial) e interpolación por trazadores cúbicos (splines). La primera produce un polinomio (en este caso se escogió un polinomio de orden 12, que experimentalmente probó ser el de mayor orden posible) que se ajusta a los datos de la mejor forma desde un punto de vista del error mínimo cuadrático producido. Tiene la ventaja de que produce una señal "limpia" (es decir, puede disminuir el ruido) y con una derivada continua. Sin embargo, dependiendo de la tasa de cambio que exista en la señal original, puede producir pérdida en la información. La segunda forma de interpolación produce la mejor aproximación en términos de ajustarse a la información presente, y eso significa que si existe ruido en la señal original, la señal interpolada también lo contendrá.

Por otro lado, para reducir el ruido se utilizan filtros pasa-bajas (ya que la señal producida por un condensador de aspiración consta de datos que representan de alguna forma la promediación de la densidad de movilidad iónica y por ello contiene únicamente frecuencias relativamente bajas). En este caso se propone, por razones experimentales, un filtro numérico Butterworth de cuarto orden sin desfasamiento con una frecuencia de corte de $0.5~\omega_n$ (es decir, a la mitad de las frecuencias presentes debidas al intervalo de muestreo).

Se utilizaron cinco gaussianas con diferentes características y 100 puntos entre 0.5 y 1.5 cm²/v·seg como señal de entrada, calculando su transformada directa como 33 puntos entre 0 y 10 volts (simulando la forma de muestreo en la base de datos de densidades de corriente iónica). Se aplicaron las diferentes interpolaciones (o ninguna de ellas) con y sin filtrado para comparar los resultados de una transformación inversa.

Como siguiente paso, se aplicaron los diferentes esquemas a datos reales de halotano al 0.2% en un gas portador de $50\%O_2/50\%N_2O$.

3.4.4.3. Transformadas inversas

Se realizó la transformada inversa de las densidades de corriente iónica correspondientes a iones negativos y positivos de halotano e isofluorano en concentraciones de 0.2%, 0.5%, 1%, 3%, y 5%, y para enfluorano se realizó además para 7%. Para ello se utilizaron las características del condensador de aspiración prototipo descritas en la tabla 3.2. y la transformada inversa discreta de Tammet. Se utilizó interpolación por trazadores y ningún filtrado.

3.4.5. Obtención de la función de relación experimental

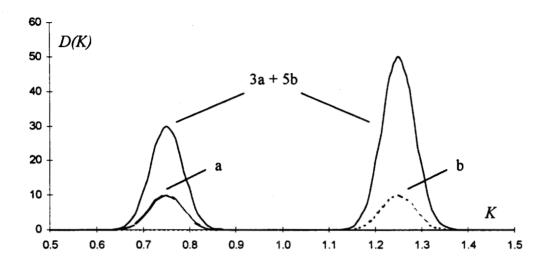
Se determinó una función de relación G' experimental basada en todas las señales pertinentes de las bases de datos (31 curvas) uniformemente espaciadas en cada uno de los dominios (al no tener el mismo significado de la función G específica que describe al condensador de aspiración, no tiene la restricción del espaciado hiperbólico). Las densidades de movilidad iónica se obtuvieron mediante interpolación por trazadores cúbicos (splines) como 31 puntos entre 0.53 y 1.5 cm²/v·seg, y las densidades de corriente iónica como 31 puntos entre 0.1 y 10 volts. Para estas últimas no pueden utilizarse los datos correspondientes a cero volts, ya que constituyen un vector nulo que no permite la existencia de la función G inversa. Se repitió el experimento para las mismas señales pero normalizadas en área. Con esto se produce una función de relación que no refleja cambios en las condiciones de ganancia entre cada medición de los datos de entrada.

Por otro lado, se calculó una función de relación exclusiva para iones negativos y otra para iones positivos. Al solo existir 15 curvas para los primeros y 16 para los últimos, se requirió de la interpolación de las curvas correspondientes a 15 y 16 puntos respectivamente. Esto se realizó para obtener funciones de relación que contuvieran información que reflejara los procesos que producen una función de transferencia pertinente a cada polaridad.

3.4.5.1. Transformadas inversas utilizando la función de relación experimental

Utilizando la primera función de relación experimental descrita (debido a que presenta mayor resolución que las funciones relativas a cada polaridad), se calculó su inversa y se extrapolaron las funciones inversas de datos no presentes en el cálculo de la función, correspondientes a iones positivos y negativos de sevofluorano (0.2%, 0.5%, 1%, 3%, y 5%) y desfluorano (0.5%, 1%, 3%, 5%, 7%, 12% y 18%), ambos en un gas portador de 50%O₂/50%N₂O, con el fin de determinar su aplicabilidad.

4.1. Linealidad de la Transformada de Tammet



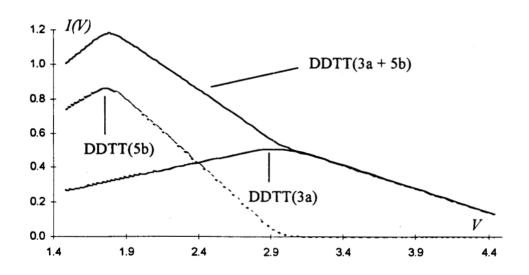


Figura 4.1. Linealidad de la transformada de Tammet. Arriba: Densidades de movilidad iónica gaussianas con a) media=0.75, σ=0.05 y amplitud=10. b) media=1.25, σ=0.05 y amplitud=10. c) La suma de 3a+5b.
 Abajo: La DDTT correspondiente a las densidades (3a, 5a y 3a+5a). Los parámetros para el condensador de aspiración son: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min. Puede observarse en la gráfica que la suma de las transformadas corresponde a la transformada de la suma.

4.2. Respuesta al impulso

En la figura 4.2 puede observarse que la respuesta al impulso de la transformada de Tammet representa la forma de la función G correspondiente a la posición del impulso.

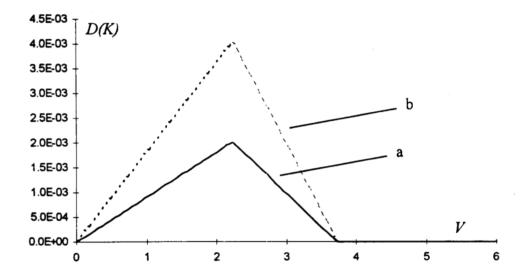


Figura 4.2. Respuesta al impulso. a) Transformada directa de Tammet de la función D(K)=1 para K=1 y cero para todo otro punto, como una aproximación al impulso unitario. La integral numérica de esta función es entonces 1*Δ(K). En este caso, Δ(K)=1/100. b) Función G correspondiente a K=1, en donde D(K) es diferente de cero. Los parámetros para el condensador de aspiración son: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min. Los parámetros A y B correspondientes son: A=2.222222 y B=3.703703. El máximo de la función es (1-(A/B))* Δ(K)=0.4*Δ(K)=0.004, y ocurre en V=A/K=2.22222/1=2.222222. Nótese que la curva a) es equivalente a b) multiplicada por el flujo.,

4.3. Cambios en la respuesta producidos por variaciones en la entrada

4.3.1. Variaciones en la cantidad de iones (amplitud)

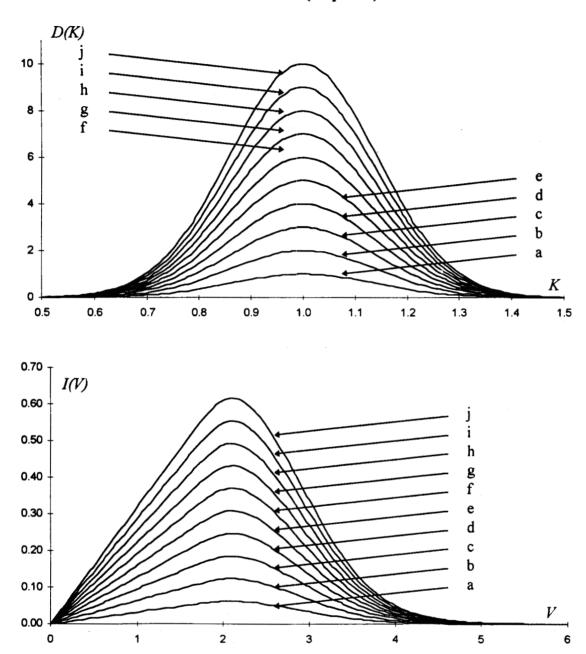


Figura 4.3. Variaciones en la amplitud. Arriba: Densidades de movilidad iónica gaussianas con σ=0.2, media=1, y amplitudes de a) 1, b) 2, c) 3, d) 4, e) 5, f) 6, g) 7, h) 8, i) 9 y j) 10. Abajo: La DDTT correspondiente a cada densidad. Los parámetros para el condensador de aspiración son: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min.

4.3.2. Variaciones en la movilidad (desplazamiento)

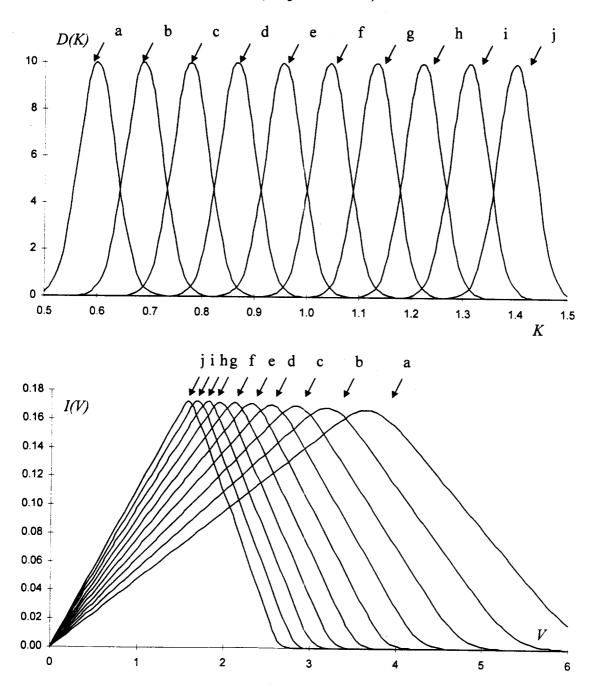


Figura 4.4. Variaciones en el desplazamiento. Arriba: Densidades de movilidad iónica gaussianas con σ =0.05, media a) 0.6, b) 0.689, c) 0.778, d) 0.867, e) 0.956, f) 1.044, g) 1.133, h) 1.222, i) 1.311 y j) 1.4, y una amplitud de 10. Abajo: La DDTT correspondiente a cada densidad. Los parámetros para el condensador de aspiración son: longitud del precolector: 0.15 cm, longitud precolector+colector: 0.25 cm, altura: 0.04 cm, ancho: 0.6 cm, flujo: 0.5 l/min.

4.3.3. Variaciones en la cantidad de especies iónicas (desviación estándar)

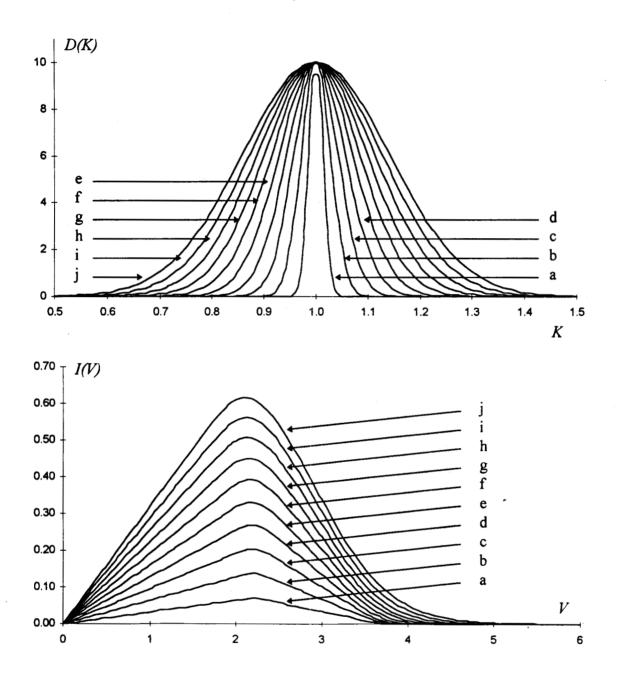


Figura 4.5. Variaciones en la desviación estándar. Arriba: Densidades de movilidad iónica gaussianas con σ de a) 0.02, b) 0.04, c) 0.06, d) 0.08, e) 0.10, f) 0.12, g) 0.14, h) 0.16, i) 0.18 y j) 0.2, media=1 y una amplitud de 10, Abajo: La DDTT correspondiente a cada densidad. Los parámetros para el condensador de aspiración son: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura: 0.04 cm, ancho: 0.6 cm, flujo: 0.5 l/min.

4.3.4. Variaciones en el flujo del gas de entrada

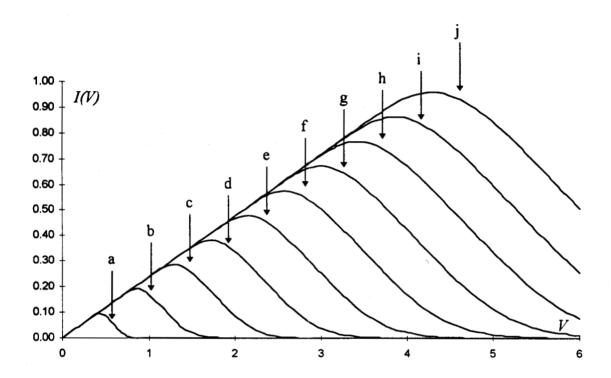


Figura 4.6. Variaciones en el flujo. La densidad de movilidad iónica de entrada es una gaussiana con σ=0.15, media=1 y una amplitud de 10. En la figura se muestra la DDTT correspondiente para un condensador de aspiración con los siguientes parámetros: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura:0.04 cm, ancho: 0.6 cm, flujo: a) 0.1, b) 0.2, c) 0.3, d) 0.4, e) 0.5, f) 0.6, g) 0.7, h) 0.8, i) 0.9 y j) 1 l/min.

4.3.5. Variaciones en el tamaño de la placa precolectora (xb)

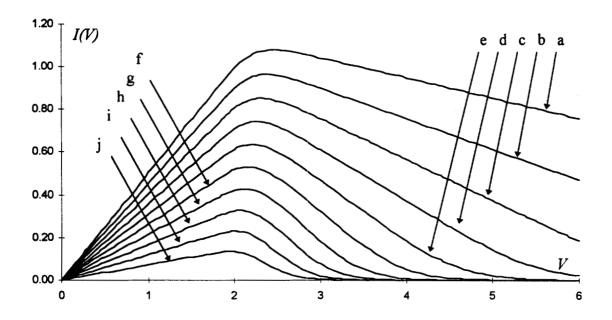


Figura 4.7. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x_a). La densidad de movilidad iónica de entrada es una gaussiana con σ=0.15, media=1 y una amplitud de 10. En la figura se muestra la DDTT correspondiente para un condensador de aspiración con los siguientes parámetros: precolector: a) 0.04, b) 0.06, c) 0.08, d) 0.10, e) 0.12, f) 0.14,g) 0.16, h) 0.18, i) 0.20 y j) 0.22 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura: 0.04 cm, ancho: 0.6 cm, flujo: 0.5 l/min.

4.3.6. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x_a-x_b)

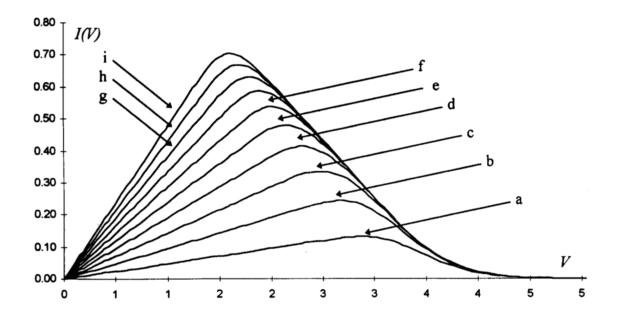


Figura 4.8. Variaciones en el tamaño de la placa colectora (x_a-x_b). La densidad de movilidad iónica de entrada es una gaussiana con σ=0.15, media=1 y una amplitud de 10. En la figura se muestra la DDTT correspondiente para un condensador de aspiración con los siguientes parámetros: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: a) 0.17, b) 0.19, c) 0.21, d) 0.23, e) 0.25, f) 0.27, g) 0.29, h) 0.31, i) 0.33 y j) 0.35 cm, altura: 0.04 cm, ancho: 0.6 cm, flujo: 0.5 l/min.

4.3.7. Variaciones en la altura de la celda

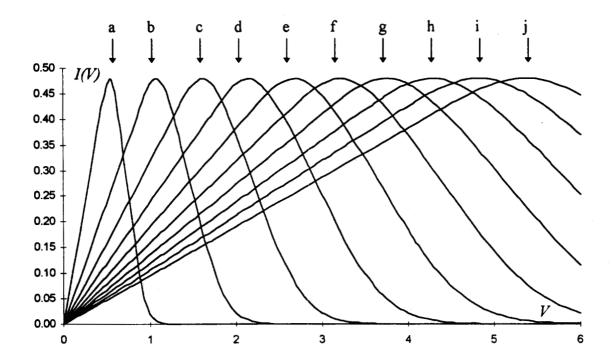


Figura 4.9. Variaciones en la altura de la celda. La densidad de movilidad iónica de entrada es una gaussiana con σ=0.15, media=1 y una amplitud de 10. En la figura se muestra la DDTT correspondiente para un condensador de aspiración con los siguientes parámetros: precolector: 0.15 cm, precolector+colector:0.25 cm, altura: a) 0.01, b) 0.02, c) 0.03, d) 0.04, e) 0.05, f) 0.06, g) 0.07, h) 0.08, i) 0.09 y j) 0.10 cm, ancho:0.6 cm, flujo: 0.5 l/min.

4.3.8. Variaciones en el ancho de la celda

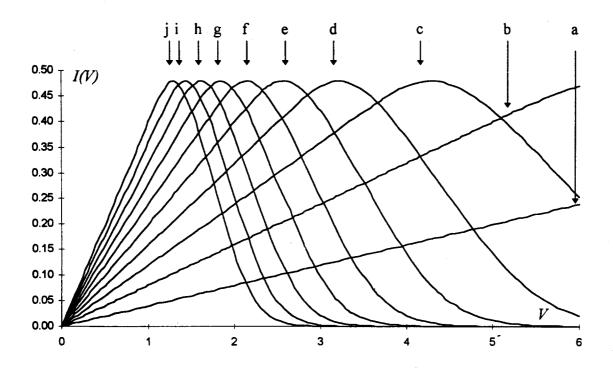


Figura 4.10. Variaciones en el ancho de la celda. La densidad de movilidad iónica de entrada es una gaussiana con σ=0.15, media=1 y una amplitud de 10. En la figura se muestra la DDTT correspondiente para un condensador de aspiración con los siguientes parámetros: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura: 0.04 cm, ancho: a) 0.1, b) 0.2, c) 0.3, d) 0.4, e) 0.5, f) 0.6, g) 0.7, h) 0.8, i) 0.9 y j) 1 cm, flujo: 0.5 l/min.

4.4. Respuesta en presencia de ruido

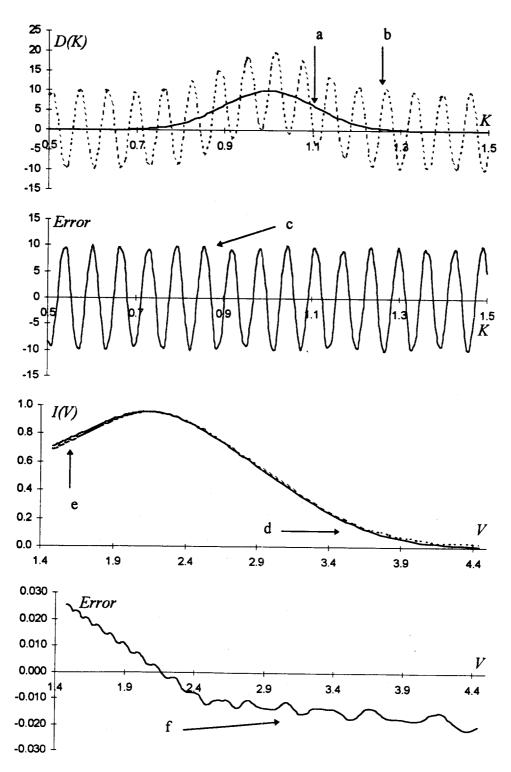


Figura 4.11. a) Densidad de movilidad iónica gaussiana con media=1, σ =0.15 y amplitud=10. b) La densidad a) contaminada con ruido senoidal de ±100% del máximo de la señal original. c) El error entre las señales a) y b). d) La DDTT de la señal a). e) La DDTT de la señal contaminada b). f) El error entre las señales d) y e). Nótese como el error en la DDTT es poco apreciable considerando su magnitud a la entrada.

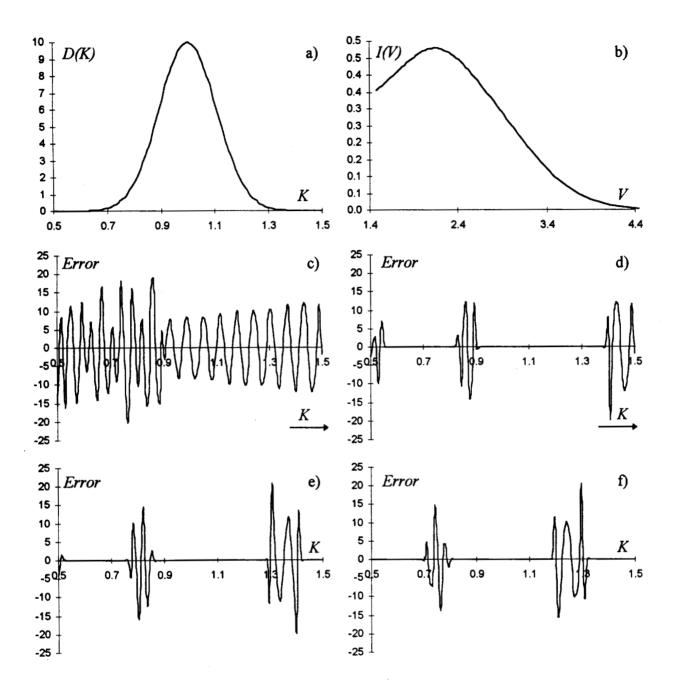


Figura 4.12. Error producido en la inversa por ruido introducido en I(V). a) Densidad de movilidad iónica gaussiana con media=1, σ=0.15 y amplitud=10. b) La DDTT correspondiente. Los parámetros para el condensador de aspiración son: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min. c) Error en la DITT comparada con la densidad original a) calculada utilizando b) con un error senoidal de ±0.1% introducido en todo el intervalo de voltaje [0.5,1.5]. d)Error en la inversa calculada introduciendo un error de ±0.1% en el intervalo de voltaje [0.5,0.601] e) Introduciendo el error en el intervalo [0.611,0.702], f) En el intervalo [0.712,0.803].

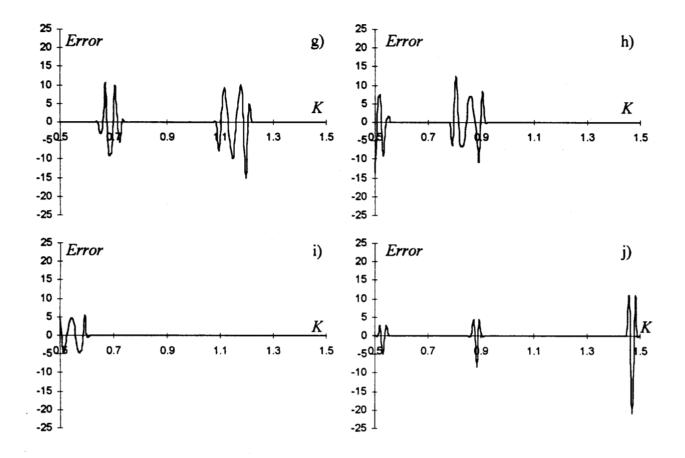


Figura 4.12. (continuación) g) En el intervalo [0.813,0.904], h) En el intervalo [1.115,1.207], i) En el intervalo [1.419, 1.5], j) Unicamente en 0.5303 V

En la figura 4.12 puede apreciarse la naturaleza del efecto producido por ruido presente en la densidad de corriente I(V) al obtener la inversa. Al ir introduciendo ruido en intervalos consecutivos en I(V), se produce un ruido con varios ecos o armónicos (por llamarles de alguna forma). Si el intervalo de ruido avanza desde valores menores de voltaje hacia voltajes mayores en la curva de densidad de corriente, entonces podemos observar como aparecen tres armónicas de ruido (figura 4.12.d) que van viajando hacia la izquierda (figura 4.12.d-i). Si se reduce el intervalo de ruido a un solo punto (figura 4.12.j), se puede observar que cada componente de ruido producido en la densidad de movilidad iónica es muy similar a un impulso.

4.5. Aplicación del modelo matemático a datos experimentales.

4.5.1. Transformadas directas experimentales.

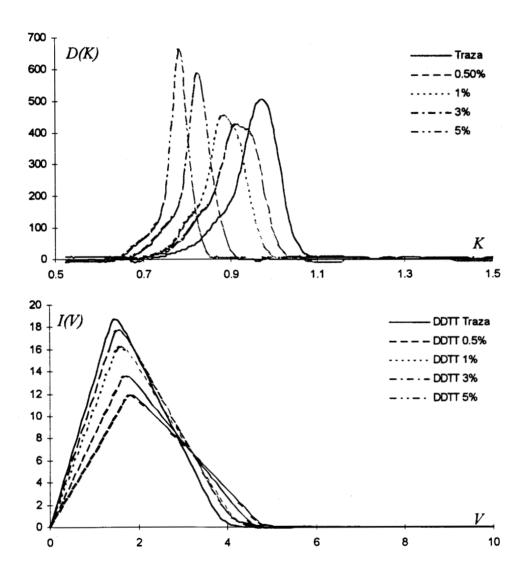


Figura 4.13. Arriba: Densidades de movilidad para iones negativos de enfluorano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O. Abajo: Transformadas directas correspondientes para las diversas concentraciones (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) utilizando 100 puntos.

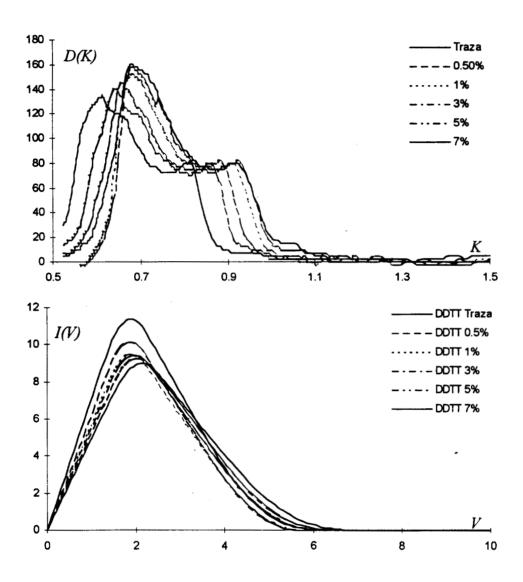


Figura 4.14. Arriba: Densidades de movilidad para iones positivos de enfluorano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O. Abajo: Transformadas directas correspondientes para las diversas concentraciones (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) utilizando 100 puntos.

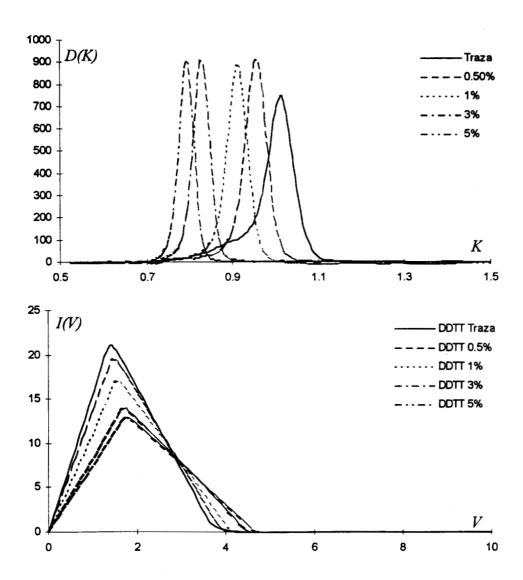


Figura 4.15. Arriba: Densidades de movilidad para iones negativos de halotano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O. Abajo: Transformadas directas correspondientes para las diversas concentraciones (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) utilizando 100 puntos.

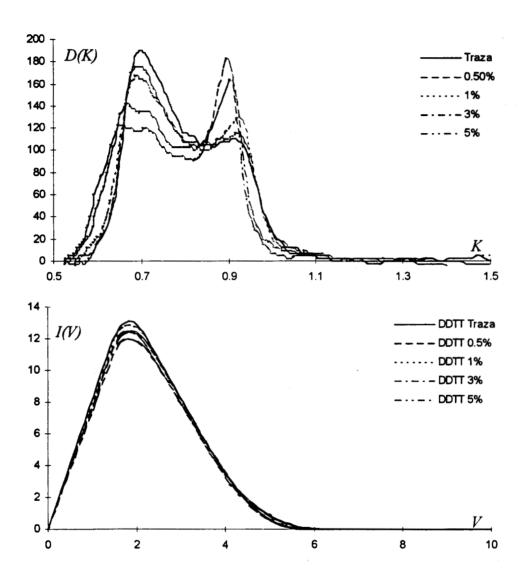


Figura 4.16. Arriba: Densidades de movilidad para iones positivos de halotano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O. Abajo: Transformadas directas correspondientes para las diversas concentraciones (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) utilizando 100 puntos.

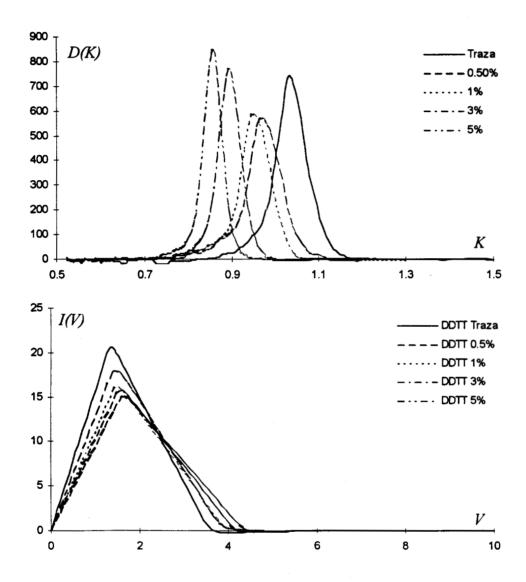


Figura 4.17. Arriba: Densidades de movilidad para iones negativos de isofluorano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O. Abajo: Transformadas directas correspondientes para las diversas concentraciones (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) utilizando 100 puntos.

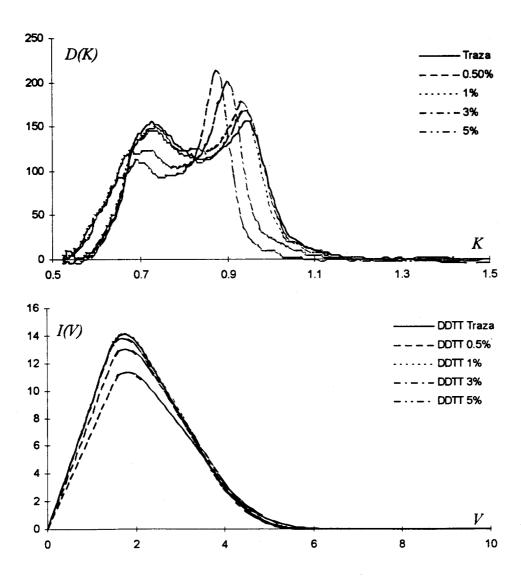


Figura 4.18. Arriba: Densidades de movilidad para iones positivos de isofluorano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O. Abajo: Transformadas directas correspondientes para las diversas concentraciones (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) utilizando 100 puntos.

En las figuras 4.19-4.24 puede observarse mediante el análisis de las derivadas que la transformada directa de Tammet discreta no presenta algunos puntos de inflexión que sí están presentes en los datos obtenidos mediante el condensador de aspiración. Esto es particularmente notable a bajos voltajes, donde existe una pendiente que la DDTT no puede duplicar.

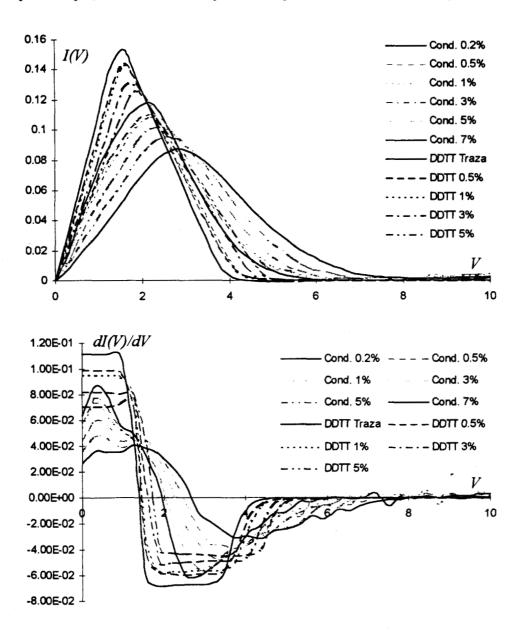


Figura 4.19. Arriba: Comparación de la DDTT para iones negativos de enfluorano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O calculada para un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) y los datos recogidos por un condensador en experimentos de laboratorio. 33 muestras. Abajo: Comparación de las derivadas de las curvas anteriores.

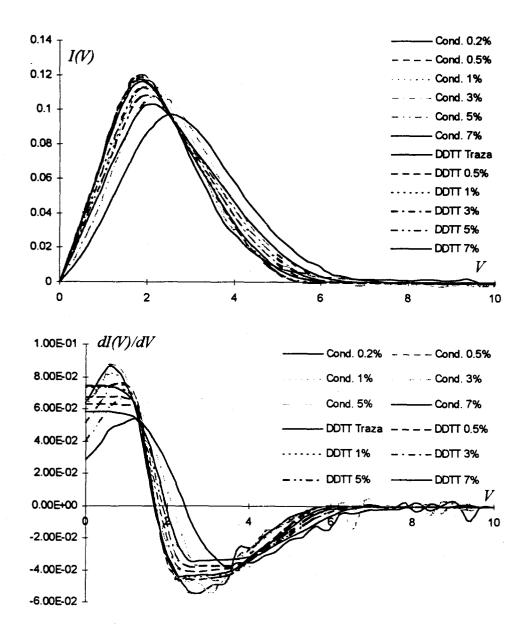


Figura 4.20. Arriba: Comparación de la DDTT para iones positivos de enfluorano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% $O_2/50\%$ N_2O calculada para un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) y los datos recogidos por un condensador en experimentos de laboratorio. 33 muestras. Abajo: Comparación de las derivadas de las curvas anteriores.

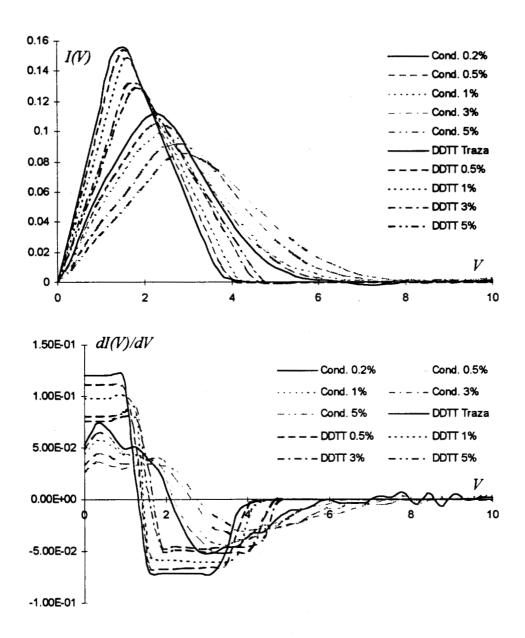


Figura 4.21. Arriba: Comparación de la DDTT para iones negativos de halotano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O calculada para un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) y los datos recogidos por un condensador en experimentos de laboratorio. 33 muestras. Abajo: Comparación de las derivadas de las curvas anteriores.

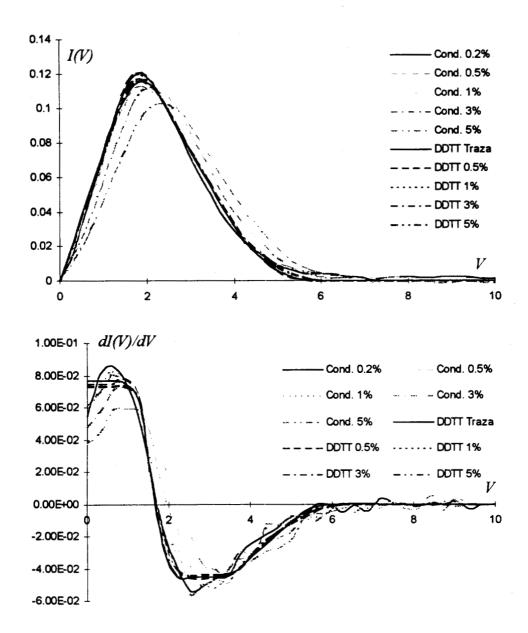


Figura 4.22. Arriba: Comparación de la DDTT para iones positivos de halotano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O calculada para un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) y los datos recogidos por un condensador en experimentos de laboratorio. 33 muestras. Abajo: Comparación de las derivadas de las curvas anteriores.

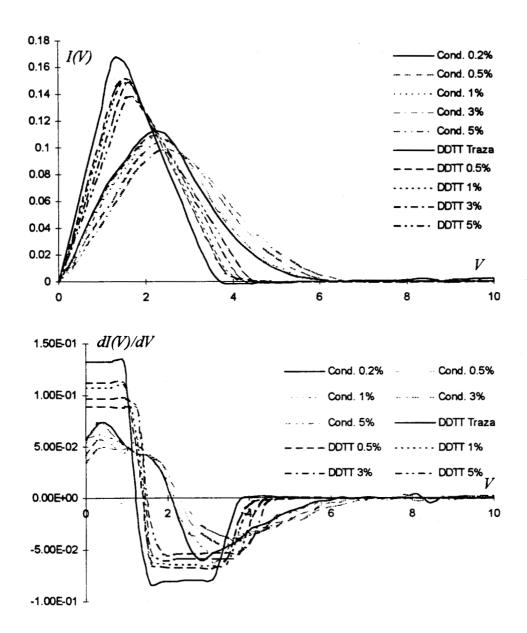


Figura 4.23. Arriba: Comparación de la DDTT para iones negativos de isofluorano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O calculada para un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) y los datos recogidos por un condensador en experimentos de laboratorio. 33 muestras. Abajo: Comparación de las derivadas de las curvas anteriores.

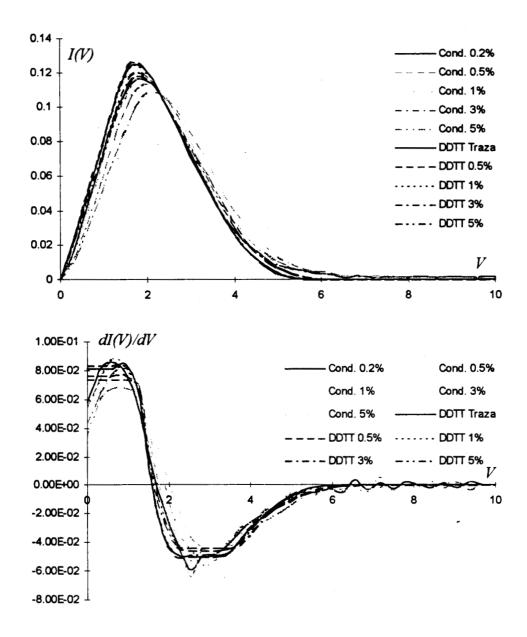


Figura 4.24. Arriba: Comparación de la DDTT para iones positivos de isofluorano en diversas concentraciones en un gas portador de 50% O₂/50% N₂O calculada para un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) y los datos recogidos por un condensador en experimentos de laboratorio. 33 muestras. Abajo: Comparación de las derivadas de las curvas anteriores.

4.5.2. Transformadas inversas experimentales

4.5.2.1. La función G inversa

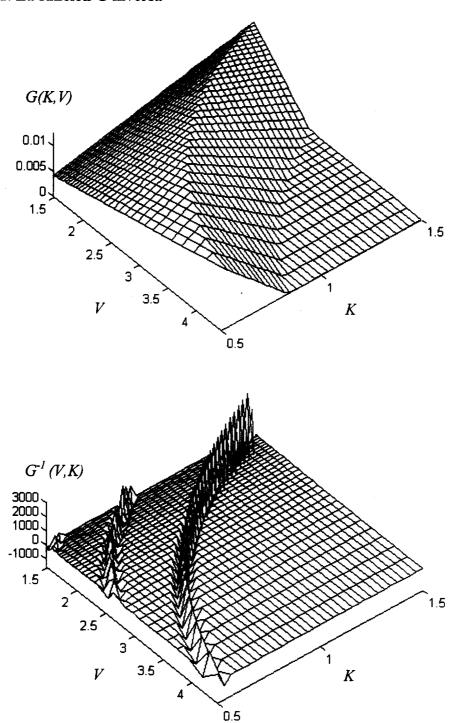


Figura 4.25. Arriba: Función G (precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) calculada para datos espaciados uniformemente en K e hiperbólicamente en V.

Abajo: La función G inversa correspondiente.

En la figura 4.25 se observa como la función G inversa representa una pared de impulsos con forma hiperbólica dada por KV=A, con diferentes paredes "armónicas" de impulsos.

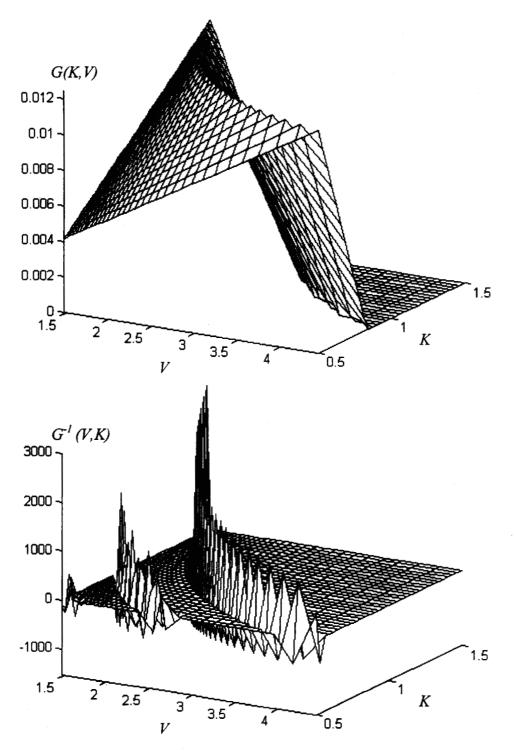


Figura 4.25. (cont.) Vista desde otro ángulo de las mismas funciones. Arriba: Función G (precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) calculada para datos espaciados uniformemente en K e hiperbólicamente en V. Abajo: La función G inversa correspondiente.

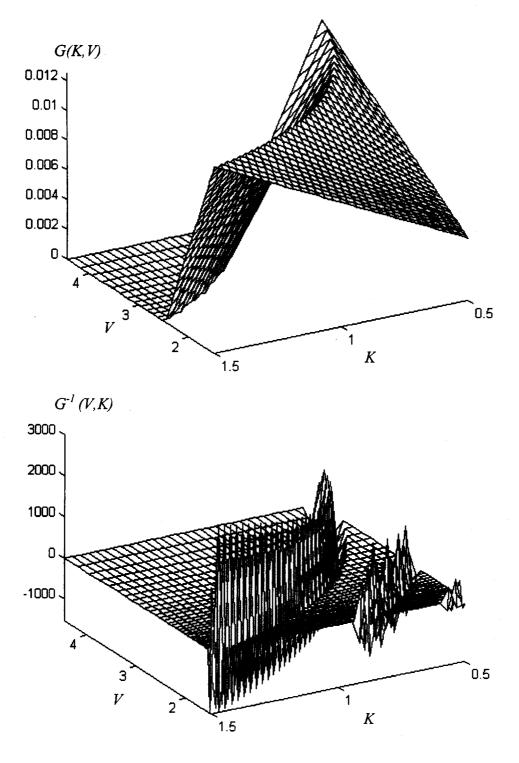


Figura 4.25. (cont.) Vista desde otro ángulo de las mismas funciones. Arriba: Función G (precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) calculada para datos espaciados uniformemente en K e hiperbólicamente en V. Abajo: La función G inversa correspondiente.

En la figura 4.26 se observa como la altura de la pared de impulsos varía con el espaciado.

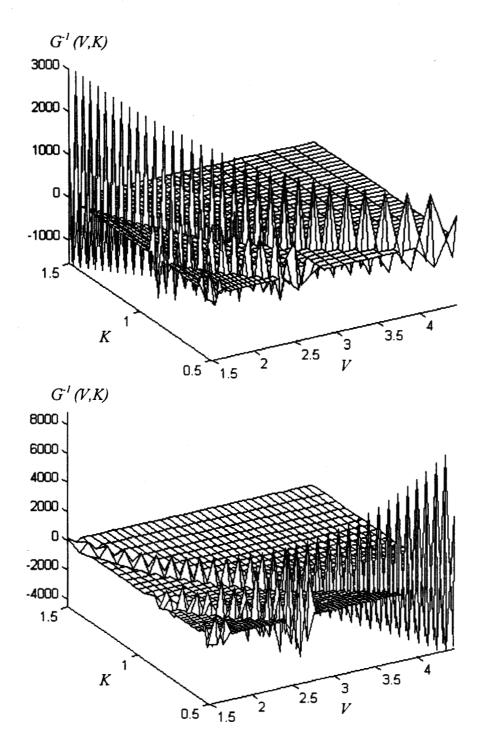


Figura 4.26. Comparación entre funciones G inversas al utilizar diferentes esquemas de muestreo para un mismo condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min). Arriba: Función G inversa calculada para datos espaciados uniformemente en K e hiperbólicamente en V. Abajo: Función G inversa calculada para datos espaciados hiperbólicamente en K y uniformemente en V.

4.5.2.2. Métodos de interpolación y disminución de ruido

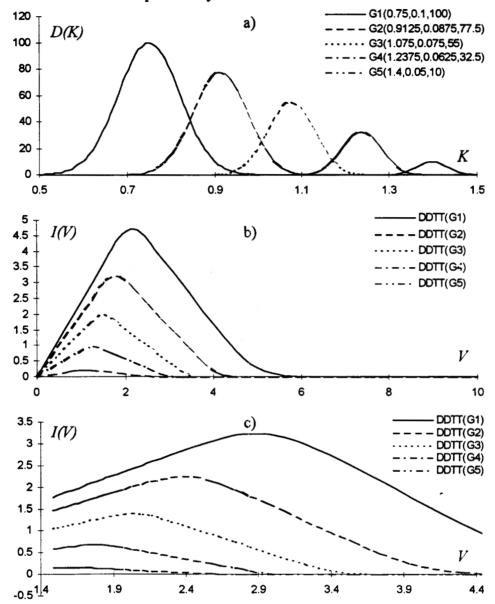


Figura 4.27. a) En la figura se muestran 5 señales gaussianas con características dadas (media, σ, altura). Cada señal se compone de 100 muestras. b) La transformada directa de Tammet calculada a partir de las entradas anteriores de forma análoga a los datos obtenidos para la base de datos del condensador de aspiración:
33 muestras uniformemente espaciadas entre 0 y 10 volts. c) La transformada directa de Tammet calculada para 33 puntos hiperbólicamente espaciados que corresponden al intervalo de interés especificado para las gaussianas mediante la relación KV=A, donde A es una constante que depende de las características del sensor: precolector: 0.15 cm, precolector+colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min. Esto corresponde a A=2.2222 y B=3.7037.

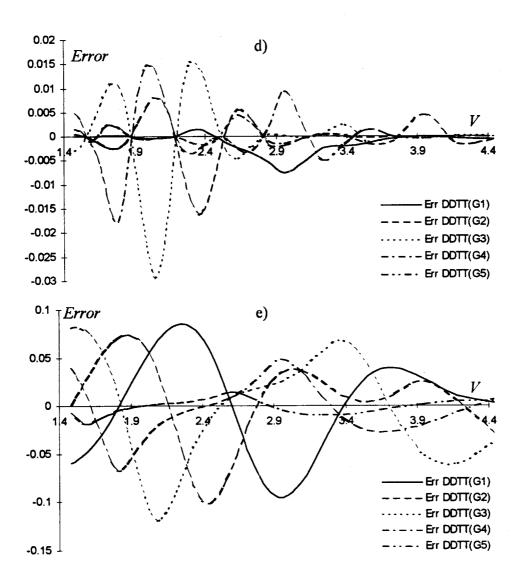


Figura 4.27. (cont.) d) Error producido al aproximar las funciones mostradas en la figura 4.27.c mediante interpoladores cúbicos (splines) a partir de los datos de la figura 4.27.b. e) Error producido al hacer la misma aproximación, esta vez utilizando interpolación polinomial (regresión polinomial, orden 12) y calculando los datos para los polinomios obtenidos.

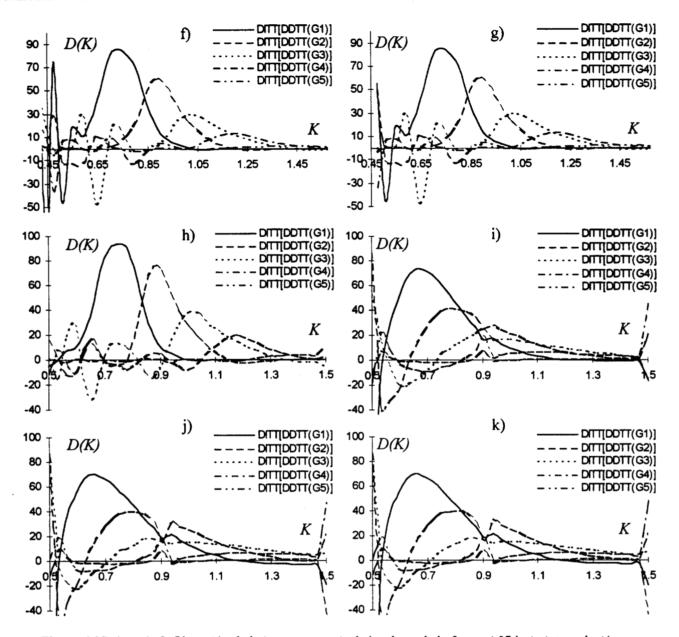


Figura 4.27. (cont.) f) Obtención de la inversa a partir de los datos de la figura 4.27.b sin interpolación, obteniendo un eje de movilidad hiperbólicamente espaciado mediante la relación KV=A. El punto correspondiente a V=0 no se ha tomado en cuenta pues produce una indeterminación, por lo que en lugar de 33 muestras, el resultado solo posee 32. Se muestra el resultado únicamente en el intervalo de interés. Fuera de él se produce ruido debido a los datos redundantes. g) La inversa obtenida de nuevo sin interpolación, pero utilizando únicamente los puntos que mediante la relación KV=A producen datos en el intervalo de interés. En este caso se eliminaron 21 datos de los 33 originales. Aún así, el resultado es aproximadamente el mismo. h) Inversas obtenidas utilizando datos obtenidos mediante interpolación por trazadores cúbicos (splines). 33 puntos. i) Utilizando interpolación por trazadores cúbicos a datos previamente filtrados (filtro Butterworth de cuarto orden sin desplazamiento de fase, frecuencia de corte a 0.3ω_n). j) Utilizando interpolación polinómica (de orden 12). k) Utilizando interpolación polinómica (de orden 12) sobre datos previamente filtrados.

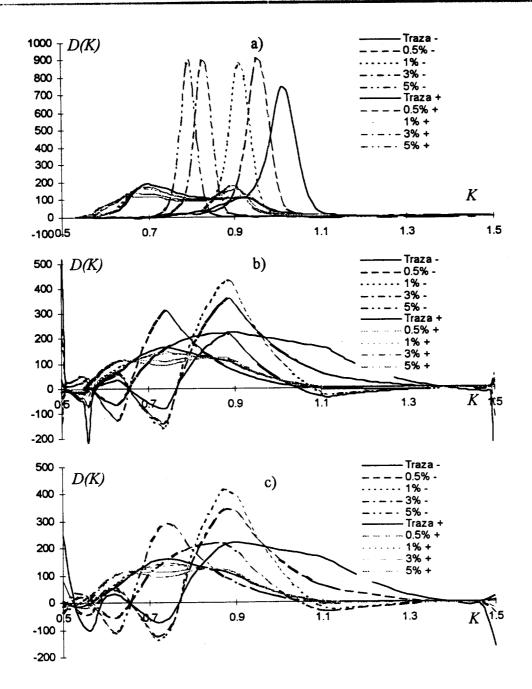


Figura 4.28. a) Datos experimentales. Curvas correspondientes a iones negativos y positivos de halotano en diversas concentraciones en un gas portador compuesto por 50% O_2 / 50% N_2O , 159 muestras obtenidas mediante un espectrómetro de movilidad iónica. b) Inversa con 100 puntos. Primero se obtuvo una transformada directa uniformemente espaciada utilizando los parámetros de un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, precolector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min), de 0 a 10 volts, con solo 33 puntos. Posteriormente se utilizaron trazadores cúbicos (splines) para encontrar los puntos necesarios para obtener la inversa. c) Inversa con solo 33 puntos. Nótese que a pesar de tener menos puntos, la posición de los puntos importantes es aproximadamente la misma que en aquella con 100 puntos.

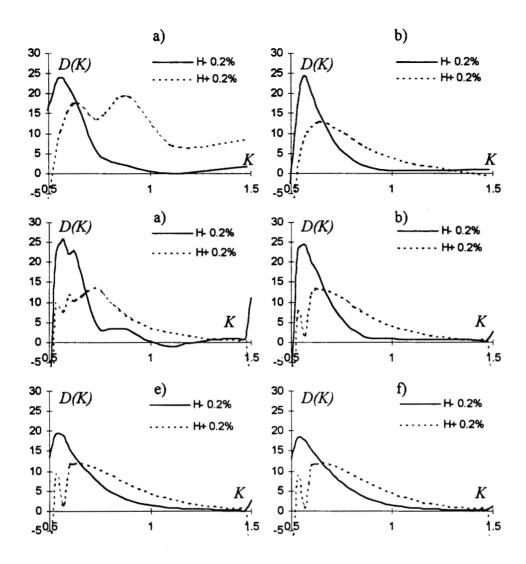


Figura 4.29. Inversas correspondientes a curvas obtenidas para iones negativos y positivos de halotano al 0.2% en un gas portador 50% O₂/50% N₂O mediante un condensador de aspiración prototipo (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) con una resolución de 33 muestras uniformemente espaciadas entre 0 y 10 volts. a) Inversas obtenidas al eliminar 26 puntos (3 al principio, 23 al final) y utilizar solo aquellos que, mediante la relación KV=A, corresponden al intervalo K=[0.5, 1.5]. b) Inversas obtenidas primero filtrando la señal original (filtro Butterworth, cuarto orden sin desfasamiento, frecuencia de corte 0.5ω_n) y utilizando solo 7 puntos, de la misma manera que en el inciso anterior. c) Inversas obtenidas a partir de datos de entrada interpolados a 33 nuevos puntos útiles mediante trazadores cúbicos (splines). d) Lo mismo que el inciso anterior, pero se realizó un filtrado previo a la interpolación. e) Inversas obtenidas después de interpolar mediante regresión polinomial (orden 12). f) Para este caso se realizó primero un filtrado antes de la interpolación polinomial.

4.5.2.3. Transformadas inversas experimentales

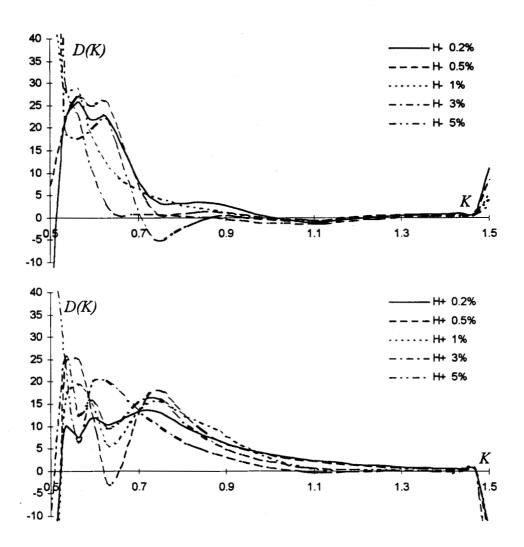


Figura 4.30. Transformadas inversas a partir de datos experimentales de densidades de corriente iónica obtenidos utilizando el prototipo de un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) con una resolución de 33 muestras uniformemente espaciadas entre 0 y 10 volts para diversos gases en diferentes concentraciones. Las Inversas fueron obtenidas al primero filtrar la señal original (filtro Butterworth, cuarto orden sin desfasamiento, frecuencia de corte 0.4ω_n) y luego obtener una nueva señal de entrada interpolada a 33 nuevos puntos útiles mediante trazadores cúbicos (splines). Curvas correspondientes a iones negativos (arriba) y positivos (abajo) de Halotano en diversas concentraciones en un gas portador 50% O₂/50% N₂O.

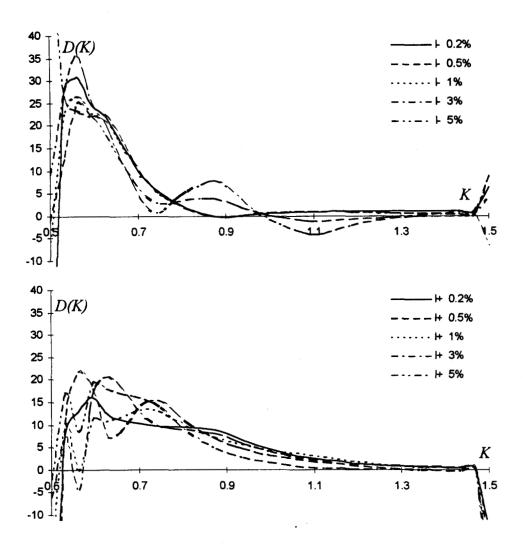


Figura 4.30. (cont.) Transformadas inversas a partir de datos experimentales de densidades de corriente iónica obtenidos utilizando el prototipo de un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) con una resolución de 33 muestras uniformemente espaciadas entre 0 y 10 volts para diversos gases en diferentes concentraciones. Las Inversas fueron obtenidas al primero filtrar la señal original (filtro Butterworth, cuarto orden sin desfasamiento, frecuencia de corte 0.4ω_n) y luego obtener una nueva señal de entrada interpolada a 33 nuevos puntos útiles mediante trazadores cúbicos (splines). Curvas correspondientes a iones negativos (arriba) y positivos (abajo) de isofluorano en diversas concentraciones en un gas portador 50% O₂/50% N₂O.

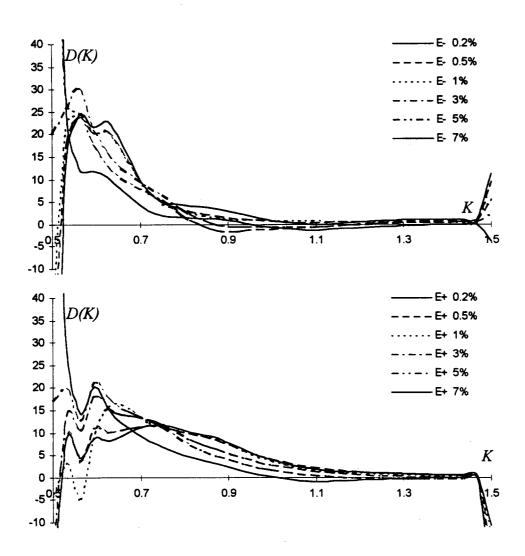


Figura 4.30. (cont.) Transformadas inversas a partir de datos experimentales de densidades de corriente iónica obtenidos utilizando el prototipo de un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) con una resolución de 33 muestras uniformemente espaciadas entre 0 y 10 volts para diversos gases en diferentes concentraciones. Las Inversas fueron obtenidas al primero filtrar la señal original (filtro Butterworth, cuarto orden sin desfasamiento, frecuencia de corte 0.4ω_n) y luego obtener una nueva señal de entrada interpolada a 33 nuevos puntos útiles mediante trazadores cúbicos (splines). Curvas correspondientes a iones negativos (arriba) y positivos (abajo) de enfluorano en diversas concentraciones en un gas portador 50% O₂/50% N₂O.

4.5.3. Obtención experimental de la función de relación

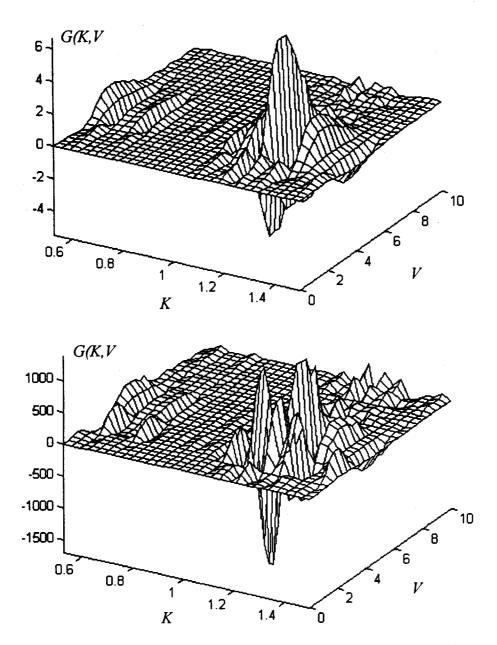


Figura 4.31. Función G calculada experimentalmente a partir de densidades de corriente iónica obtenidas utilizando el prototipo de un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) con una resolución de 33 puntos, interpoladas a 31 puntos entre 0.1 y 10 volts, y densidades de movilidad iónica, obtenidas mediante un espectrómetro de movilidad iónica con una resolución de 159 puntos entre 0.52 y 1.5 cm²/vs e interpoladas a 31 puntos entre 0.53 y 1.5 cm²/vs. Arriba: Función G calculada utilizando los datos obtenidos. Abajo: Función G calculada utilizando los datos normalizados en área.

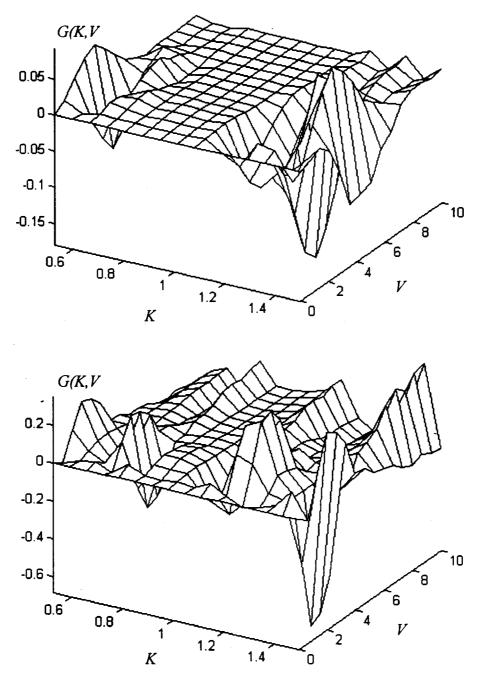


Figura 4.31. (cont.) Función G calculada experimentalmente a partir de densidades de corriente iónica obtenidas utilizando el prototipo de un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) con una resolución de 33 puntos, interpoladas a 15 puntos entre 0.1 y 10 volts para iones negativos y a 16 puntos para iones positivos, y densidades de movilidad iónica, obtenidas mediante un espectrómetro de movilidad iónica con una resolución de 159 puntos entre 0.52 y 1.5 cm²/vs e interpoladas a 15 y 16 puntos respectivamente entre 0.53 y 1.5 cm²/vs. Arriba: Función G calculada utilizando los datos únicamente para iones positivos

4.5.3.1. Transformadas inversas mediante la función experimental de relación

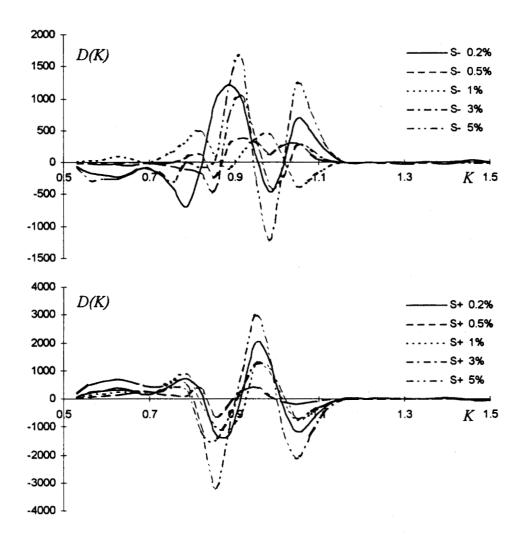


Figura 4.32. Transformadas inversas calculadas a partir de la inversa de una función G calculada experimentalmente a partir de densidades de corriente iónica obtenidas utilizando el prototipo de un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) con una resolución de 33 puntos, interpoladas a 31 puntos entre 0.1 y 10 volts, y densidades de movilidad iónica, obtenidas mediante un espectrómetro de movilidad iónica con una resolución de 159 puntos entre 0.52 y 1.5 cm²/vs e interpoladas a 31 puntos entre 0.53 y 1.5 cm²/vs. Arriba: Inversas correspondientes a iones negativos de sevofluorano. Abajo: Inversas correspondientes a iones positivos.

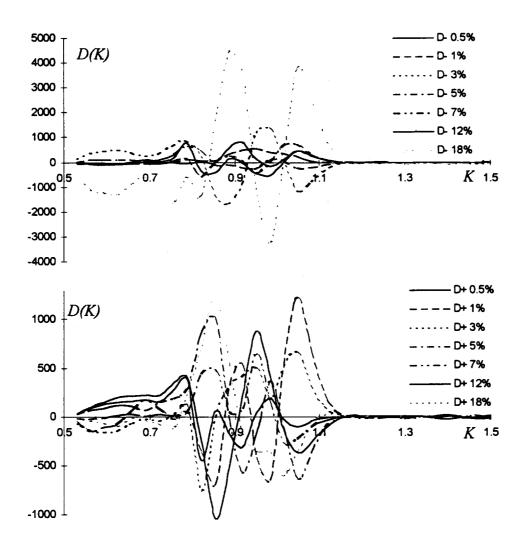


Figura 4.32. (cont.) Transformadas inversas calculadas a partir de la inversa de una función G calculada experimentalmente a partir de densidades de corriente iónica obtenidas utilizando el prototipo de un condensador de aspiración (precolector: 0.15 cm, colector: 0.25 cm, altura 0.04 cm, ancho 0.6 cm, flujo 0.5 l/min) con una resolución de 33 puntos, interpoladas a 31 puntos entre 0.1 y 10 volts, y densidades de movilidad iónica, obtenidas mediante un espectrómetro de movilidad iónica con una resolución de 159 puntos entre 0.52 y 1.5 cm²/vs e interpoladas a 31 puntos entre 0.53 y 1.5 cm²/vs. Arriba: Inversas correspondientes a iones negativos de desfluorano. Abajo: Inversas correspondientes a iones positivos.

V DISCUSIÓN

5.1. La transformada de Tammet

Como pudo comprobarse, la transformada de Tammet, planteada de la manera en que se ha hecho en esta tesis, es una operación lineal (fig. 4.1) que relaciona el dominio de la movilidad iónica (en el cual se obtienen, aunque no directamente, los resultados de aparatos como el espectrómetro de movilidad iónica y que tiene una importancia obvia desde el punto de vista físico y químico) con el dominio de la corriente iónica (en el cual se obtienen los resultados del condensador de aspiración).

La transformada de Tammet puede discretizarse para su aplicación en sistemas basados en un condensador de aspiración controlado por microcomputadoras o microcontroladores, y posee una inversa bajo ciertas características que se discuten en esta tesis.

5.1.1. La transformada directa

Como pudo observarse mediante aplicación de la transformada, un condensador de aspiración es capaz de reflejar variaciones en los gases analizados produciendo señales de salida que evidencían estos cambios de manera distinta (figuras 4.3 a 4.10), haciendo relativamente fácil de identificar qué cambio ha sucedido entre una medición y otra comparando las señales de salida. Aún en el caso de variaciones en la cantidad de iones y la cantidad de especies iónicas, las cuales parecen producir los mismos cambios en la salida (figuras 4.3 y 4.5) existe una diferencia. En el primer caso varía la amplitud de la señal de salida pero no la forma de la curva. En el segundo caso varían ambas, haciéndose más redondeados alrededor del valor máximo.

Aplicando entradas impulso a la transformada, pudo constatarse que esto produce a la salida señales que reflejan la forma exacta de la función G (figura 4.2) correspondiente a la posición del impulso. Este resultado es de suma importancia ya que permite en la práctica encontrar la función G que describa, incluyendo efectos de orden superior, a un condensador de aspiración particular. Para ello es necesario recurrir a una mezcla de gas que produzca un efecto similar a una función impulso (por ejemplo, N₂), conteniendo iones de una sola especie y agrupaciones de iones con una misma movilidad.

El ruido que contamina a una señal de densidad de movilidad iónica tiene poco efecto sobre la transformada directa (figura 4.11). Esto es debido a la naturaleza de ésta, en la que cada punto se obtiene mediante integración de la señal completa escalada mediante la función G, proceso que funciona como un filtro. Además, gracias a la linealidad del proceso, el resultado final es la suma de la transformada de la señal original y la transformada del ruido. Esto permitirá

la aplicación de una gran variedad de herramientas de modelado de ruido que permitan su eliminación parcial o completa, dependiendo de la naturaleza del ruido, a la salida.

Hablando de su desempeño con datos reales, estudiando los resultados obtenidos al aplicar la teoría de la transformada directa discreta de Tammet a los datos experimentales de densidades de movilidad iónica y compararlos con los datos obtenidos por el condensador de aspiración prototipo, podemos percatarnos de una semejanza general en el tipo de curvas obtenidas pero con diferencias bastante notables. Las curvas obtenidas mediante la transformada mantienen una similitud con sus contrapartes pues se utilizan en ambas mezclas gaseosas con la misma composición, pero en el caso de la transformada el modelo es ideal y no toma en cuenta efectos de segundo orden, como la varianza en la componente del movimiento aleatorio (browniano), el frente parabólico del flujo, gradientes de concentración de iones o agrupamiento de éstos, recombinación, colisión con las paredes de la celda, etc. Un reflejo del efecto que tiene esta idealización del modelo en las curvas obtenidas puede ser observado en las curvas de derivada (figuras 4.19 a 4.24). Las curvas producidas mediante el modelo no pueden reproducir la pendiente que tienen las curvas experimentales para voltajes pequeños, en donde se presentan puntos de inflexión que reflejan efectos no tomados en cuenta.

Por otro lado, no todas las diferencias se deben a la simplicidad del modelo. No puede esperarse que las curvas sean idénticas, aún con un modelo perfecto, debido a que las condiciones y variables de trabajo para cada aparato (el IMS y el condensador de aspiración) son diferentes. Ambos tienen diferentes fuentes de ionización con capacidades de ionización distintas. Lo mismo sucede con la intensidad de los campos eléctricos, geometría de la trayectoria de los iones, densidades de los gases, tiempos de reacción (entre la ionización y la detección) y la longitud de la región de arrastre. Además, en el condensador de aspiración iones de ambas polaridades se separan bajo el efecto del campo eléctrico en la misma cámara en que se detectan, y esto produce un gradiente de iones de cada polaridad que no se presenta en el IMS. Sería entonces imposible garantizar que el espectro de movilidad iónica sea el mismo para aparatos con un diseño tan radicalmente distinto. Sin embargo, lo importante es la consistencia en cada aparato, la reproductibilidad de los resultados para una misma muestra gaseosa bajo las mismas condiciones.

Un ejemplo de estas diferencias es que las curvas de la señal obtenida mediante el condensador de aspiración son mas anchas que las que se esperarían si la densidad de movilidad fuera idéntica a la obtenida con el IMS. Esto puede explicarse como debido a las dimensiones de ambos aparatos. En el tubo de arrastre del IMS, los iones viajan una distancia mucho mayor que aquella que atraviesan en un condensador de aspiración, lo cual reduce la varianza en la medición de la velocidad promedio. De hecho, se puede reproducir el mismo efecto en un IMS con un tubo de arrastre de menor dimensión.

Otro ejemplo de la diferencia entre aparatos puede observarse en las figuras 4.19 a 4.24. Las curvas de ambos aparatos son mas parecidas para iones positivos de cada mezcla gaseosa que para iones negativos. De este fenómeno podemos deducir que ocurre una formación de

agrupamientos de iones diferentes en cada aparato, siendo en el IMS donde al parecer hay una mayor fragmentación. Esto se refleja en que las curvas obtenidas mediante una transformada directa de Tammet a partir de los datos del espectrómetro de movilidad iónica presentan una desviación estándar mayor, abarcando un mayor número de especies iónicas. Esto significa que cada aparato, ya sea por la fuente de ionización u otro efecto, genera especies iónicas en forma diferente para cada polaridad, siendo esta diferencia más marcada para especies negativas.

Por otro lado, las curvas para especies iónicas negativas presentan una mayor diferencia entre sí para diferentes concentraciones de agente anestésico (figuras 4.19 a 4.24) que las positivas. Este efecto es producido por la fuerza de ionización de los halógenos, la cual tiende a robar y quedarse con cargas negativas, produciendo un mayor número de especies iónicas repartidas en un menor número de macromoléculas, lo cual no sucede para polaridades positivas. Es debido a esto que la comparación de mediciones de iones negativos permiten una mejor identificación de cambios en la cantidad de agente halogenado en la muestra gaseosa.

Comparando las diversas transformadas directas para las densidades de movilidad obtenida mediante el IMS entre si, y por otro lado comparando las diversas curvas obtenidas utilizando en condensador de aspiración entre sí, puede observarse que todas estas curvas tienden a tener la misma forma general (debido al efecto de filtro ya descrito) y esto hace muy dificil el análisis y comparación de las diferentes curvas por simple inspección, aún para una computadora [6]. Esto, junto con la importancia que desde el punto de vista fisico y químico representa la densidad de movilidad iónica, justifica ampliamente la necesidad de la transformada inversa.

5.1.2. La transformada inversa

Debido a la naturaleza de la función G (en donde la amplitud máxima es siempre menor a la unidad), la función G inversa tiene una amplitud varios ordenes de magnitud mayor (figuras 4.25 y 4.26). Estudiando las curvas obtenidas puede escribirse una ecuación empírica para una función G determinada a partir de los datos experimentales. Esta describe a una familia de hipérbolas (o una hipérbola y sus "armónicas") que se caracterizan, utilizando la misma notación que para la función G, por

$$KV = A(x_b/x_a)^1$$
, donde $l = 0, 1, 2, 3, ..., \infty$

Por supuesto, al ser una superficie discreta no es necesario encontrar la familia completa, solo es necesario hacerlo hasta donde la resolución y la posición de cada hipérbola lo permita, es decir hasta que

$$A(x_b/x_a)^1 < v_j \min(\Delta k)$$
, para cada $j = 1,2,3,...,n$, es decir, $l_{max}(j) \le \frac{\ln(V_j \min(\Delta k)/A)}{\ln(x_b/x_a)}$

con una amplitud determinada por

Amplitud_{i,j} =
$$k_i \left(\frac{1}{k_{i+1} - k_i} \right) \left(\frac{1}{k_i - k_{i-1}} \right) \left(\frac{k_{i+1} - k_{-1i}}{k_i - k_{i-1}} \right)$$
, para toda i = 1,2,..., m y j = 1,2,..., n

válida únicamente para valores de k_i y v_i que correspondan exactamente a cada hipérbola. Esta ecuación describe perfectamente los diferentes efectos que se producen en la amplitud para espaciados uniformes e hiperbólicos en la movilidad, como se muestra en la figura 4.26.

Además, cada hipérbola presenta dos pequeñas hipérbolas satélite situadas a un intervalo de muestreo de distancia de la hipérbola mayor, son negativas y dependen de la altura de la hipérbola central y la distancia que hay entre ésta y cada una de las laterales. El resultado es que se tiene una familia de hipérbolas formadas por impulsos (paredes hiperbólicas de impulsos).

Por otro lado, debido a la naturaleza de la función G inversa descrita se puede comprender la respuesta al ruido que presenta la transformada inversa de Tammet (figura 4.13). El efecto de ruido, aún si es uno de pequeña amplitud, es amplificado por los grandes valores presentes en la función G inversa, produciendo lo que parecen ser distorsiones o picos en diversos intervalos de la señal de salida, correspondientes a las diversas hipérbolas. Esto a la vez puede ser beneficioso pues puede indicar, en el lugar donde existan distorsiones evidentes, las posiciones de la señal original contaminada por ruido proporcional a su amplitud.

Las transformadas inversas de señales obtenidas mediante el condensador de aspiración fueron calculadas utilizando las señales sin filtrado y con interpolación únicamente por trazadores (la interpolación polinómica muestra el efecto de un filtro pasabajas, como puede verse en las figuras 4.27 a 4.29). A pesar de que el filtrado y la interpolación polinómica mostraron ser una buena ayuda para mejorar los resultados en presencia de ruido (figuras 4.27 a 4.29), el resultado sin éstos no muestra grandes errores y por tanto no justifica su utilización. De hecho se corre el riesgo de perder información, y solo deben utilizarse si las señales inversas se encuentran altamente contaminadas por ruido. Las inversas (figura 4.30) muestran diferencias bastante notables con respecto a las densidades de movilidad iónica obtenidas mediante el espectrómetro de movilidad iónica ó IMS (figuras 4.13 a 4.18). Este es un resultado esperado ya que funciones muy diferentes pueden tener transformadas directas de Tammet similares gracias a su efecto de integración, de modo que funciones con diferencias tan obvias tendrán transformadas inversas de Tammet completamente disimilares, gracias a la naturaleza de la función G inversa. Entre las diferencias mas notables se encuentran las movilidades a las que se encuentra la mayor cantidad de especies iónicas. De hecho, las señales obtenidas por el IMS se diferencían entre sí por la movilidad a la que ocurre cada pico, la cual disminuye conforme aumenta la concentración de anestésico, mientras que en la inversa de las señales del condensador de aspiración la movilidad se mantiene casi constante y es menor que las movilidades de sus contrapartes, diferenciándose realmente en amplitud. Al igual que en las curvas de IMS, los iones negativos presenten menores varianzas que los iones positivos, como ya hemos mencionado, y pueden diferenciarse entre sí ambas polaridades por este hecho, pero en ambos casos las varianzas que se presentan en el condensador de aspiración son mucho mayores que sus contrapartes. Además las diferencias en amplitud al comparar iones negativos y positivos es mucho menor que la que se tiene en las curvas de IMS. Este hecho parece sugerir que iones negativos y positivos forman iones de una manera mucho mas parecida entre sí en un condensador de aspiración que en un IMS.

5.1.3. La función experimental de relación

Por último, se pudieron construir funciones de relación entre el condensador de aspiración y el IMS utilizados con éxito. Estas funciones no expresan un modelo matemático del funcionamiento del condensador de aspiración como lo hace la función G originalmente descrita, sino que proporcionan la función de transferencia entre dos aparatos distintos: el espectrómetro de movilidad iónica y el condensador de aspiración. No solo funcionan de manera diferente, sino que además lo hacen bajo distintas condiciones, y toda esa información es reflejada por la función de relación.

Se obtuvieron de esta manera 4 matrices diferentes, ninguna de ellas similar a una matriz G tradicional. Una de ellas se obtuvo con todos los datos pertinentes. Posteriormente se obtuvo otra con los mismos datos pero normalizados, a fin de eliminar el efecto de condiciones diferentes de ganancia entre muestra y muestra. Ambas matrices son similares pero no iguales, lo que sugiere diferencia de condiciones de ganancia. Dado que las inversas de Tammet con datos experimentales sugieren una diferencia en la forma en que ambos aparatos manejan iones de una polaridad en relación con iones de la opuesta, se obtuvieron matrices de relación para cada polaridad. En el resultado se puede observar de una forma mas evidente que, de hecho, así es. Uno de los dos aparatos concede una diferencia mas pronunciada entre polaridades que el otro. Solo hace falta comparar las transformadas inversas y los datos de IMS para comprender que en éste último existe una diferencia mayor entre datos de cada polaridad que en el caso del condensador de aspiración, aunque aún en éste se pueden distinguir las diferencias pues ambos poseen sus características propias (salta a la vista, por ejemplo, la diferencia en varianzas).

Con la matriz de relación completa se trató de extrapolar la información a datos no incluidos en su cálculo (sevofluorano y desfluorano) pero no se lograron obtener curvas como las que se obtendrían en un IMS. La razón es que tales gases (en especial desfluorano) se presentan con características o en porcentajes fuera del rango de los demás gases y probablemente el modelo obtenido no refleja una relación completa que incluya efectos para esas características.

El resultado obtenido es realmente interesante e importante, ya que nos permite, de una manera experimental, darnos cuenta de que no puede modelarse una ecuación que relacione ambos aparatos matemáticamente al amparo de la teoría de la transformada de Tammet. Sin

embargo, y a pesar de ello, la similitud de las curvas obtenidas mediante el condensador de aspiración y la transformada de datos obtenidos mediante el IMS no hace mas que acrecentar la confianza de que el modelo, aún al no incluir efectos de orden superior, funciona bastante bien en términos de relacionar el domino de la densidad de movilidad iónica con el de la densidad de corriente iónica. Con esto nos referimos a que es consistente y no es incorrecta la manera en que relaciona ambos dominios. Lo que no es correcto suponer es que el condensador de aspiración produce iones y agrupamientos de iones que poseen en conjunto una densidad de movilidad iónica idéntica a la producida por un IMS.

Por supuesto, el modelo propuesto puede mejorarse en el futuro para describir con mayor precisión al condensador de aspiración, pero en muchas ocasiones es preferible un modelo simplificado que uno complejo, como cuando se requiere un sistema de medición que cuenta con recursos computacionales restringidos. En ese caso, lo importante es la repetibilidad de los resultados para lograr una adecuada identificación y cuantificación de los componentes de una mezcla gaseosa. Por otro lado, el modelo completo tendría gran valor para comprender de mejor manera el funcionamiento del condensador y sus variables de diseño.

VI CONCLUSIONES Y COMENTARIOS FINALES

6.1. Evaluación del modelo matemático y sus procedimientos

El modelo matemático discutido a lo largo de esta tesis permite describir los resultados obtenidos mediante un condensador de aspiración en el dominio de la densidad de corriente iónica (el modo en que se presentan los datos) o en el dominio de la movilidad iónica (de mayor significado para la comunidad científica), y pasar de uno a otro en el momento en que se desee. De esta forma, representa una contribución única al campo del análisis de movilidad iónica al servirle de enlace con éste a un sensor de tan sencilla construcción y reducido costo como es el condensador de aspiración, que representa una seria alternativa en el futuro, y que tiene muchas otras aplicaciones potenciales fuera del campo del monitoreo de gases anestésicos y del campo biomédico en general.

En su presente forma, el modelo toma en cuenta solo efectos de primer orden en forma simplificada, intercambiando exactitud por una menor complejidad, y por lo tanto representa un primer paso en la dirección correcta en el modelado completo del condensador. Así, sienta las bases para la mejor comprensión de éste, y por primera vez ilumina el camino que debe seguirse al diseñar efectivamente un aparato de este tipo.

El detector debe diseñarse de tal forma que su función G abarque todos los posibles iones producto en el dominio de la movilidad. Para una tasa de flujo del gas a ser muestreado fija, esto puede lograrse con exactitud calculando las variables físicas del sensor como son las dimensiones de la celda y las longitudes de las placas de detección. El rango de movilidad escogido, junto con la resolución e intervalo de muestreo deseado y las dimensiones del sensor dictan automáticamente por medio de la relación KV=A los valores óptimos de voltaje que deben incluirse en el barrido (y por tanto los valores del campo eléctrico) para los cuales deben realizarse las mediciones.

La utilización de la transformada inversa, además de relacionar la salida con la movilidad iónica, permite diferenciar mejor las curvas producidas por un mismo condensador de aspiración para diversas muestras gaseosas, lo cual a su vez permite que la identificación automática de cada mezcla se realice con mayor facilidad y exactitud, mediante el uso de redes neuronales por ejemplo.

Además, permite estudiar el proceso de ionización del gas, la formación de agrupaciones iónicas dentro del sensor y sus respectivas movilidades a fin de mejorar el modelo matemático que describe el comportamiento del condensador de aspiración en forma recursiva. Esto permitirá perfeccionar la técnica y facilitará el diseño de un sistema completo para uso clínico.

Para la continuación de esta investigación en el futuro será necesario realizar nuevas bases de datos que se obtengan mediante un barrido hiperbólico en el dominio del voltaje y que reflejen una resolución adecuada en el dominio de la movilidad, a fin de incluir todos los iones producto, que según pudo observarse, abarcan un rango más amplio de movilidades que en un espectrómetro de movilidad iónica, y que comienza a movilidades menores (lo cual significa que existen más especies, algunas de ellas mas pesadas y/o de mayor tamaño). La nueva base de datos debe incluir todos los gases anestésicos (halotano, isofluorano, enfluorano, sevofluorano y desfluorano) en un rango mayor de porcentajes dentro de los límites de cada uno, en diversas mezclas de gas portador. Por otro lado, también sería recomendable incluir a los gases portadores por si solos, a fin de caracterizar la respuesta del sensor de forma mas completa. Para todas estas mediciones será necesario contar con mejores sistemas de control (los cuales se están desarrollando en este momento y son el tema de otras tesis paralelas en este proyecto) que permitan aumentar la reproductibilidad de las mediciones y disminuir el ruido.

Por otro lado, también sería recomendable realizar experimentos de caracterización de la función G por separado, utilizando gases poco reactivos, como el N₂, a fin de caracterizar efectos de segundo orden, aunque es posible que existan funciones G diferentes dependiendo de la reactividad y otras características de cada mezcla gaseosa. Sin embargo, esas diferencias, si existen, serían mínimas según indican los resultados plasmados en esta tesis, y se debería principalmente a la similitud entre los agentes anestésicos.

Para convertir al condensador de aspiración en un sistema completo de monitoreo de gases anestésicos, será necesario construir un sistema de identificación y cuantificación (probablemente basado en redes neuronales y/o sistemas expertos) que utilice la transformada inversa de Tammet para obtener los datos en el dominio de la movilidad iónica (donde, como hemos dicho, existe un contenido de información mayor). También se debe incrementar la relación señal/ruido, para lo cual se puede, además de incluir un mejor sistema de control, aumentar el flujo del gas de entrada al condensador (lo que representa diluir el flujo proveniente del paciente para no afectar a éste). Esto generaría una mayor cantidad de iones, lo cual propiciaría una medición mas exacta al elevar la corriente a medir.

Por último, y si es necesario, también puede caracterizarse la salida de un condensador de aspiración particular en relación con un espectrómetro de movilidad iónica a fin de que aporten resultados similares. Esto se haría realizando suficientes muestras con mezclas gaseosas de interés y aplicando la metodología descrita para la obtención de una función de relación. No hace falta mencionar que sería un experimento sin duda interesante.



Referencias:

- [1] Youngson R., "Why anesthesia can still kill", New Scientist, Feb 9, 1991, p. 53-56
- [2] Sacristán E., "<u>Ion-Mobility Method for Inhalation Anesthesia Monitoring</u>", Ph.D. Dissertation, Worcester Polythechnic Institute, Worcester, MA, 1993
- [3] Sacristán, E., "Ion-Mobility Method and Device for Gas Analysis", U.S. patent app. 08/238,614, 1994
- [4] Eiceman G.A., Karpas Z., "Ion-Mobility Spectrometry", CRC press, 1994
- [5] Tammet H.F., "The Aspiration Method for the Determination of Atmospheric-Ion Spectra", Scientific Notes of Tartu State University, Issue 195, Transactions on Air Ionization and Electroaerosols, Tartu, Estonia, 1967, translated from russian by the Israel Program for Scientific Translations, Jerusalem, 1970
- [6] Rosenblatt R., Sacristán E., et al, "Preliminary Feasability Study of Anesthetic Agent Identification from Ion Mobility Spectra Using a Neural Network", Proceedings of the IEEE 22nd Annual Northeast Bioengineering Conference (Cat. No. 96CH35905), New Brunswick, NJ, USA, 14-15 March, 1986)
- [7] Rosenblatt R., Sacristán E., et al, "Application of Ion Mobility Analysis Method to Surgical Anesthetic Gas Monitoring", Proceedings of the IEEE 21st Annual Northeast Bioengineering Conference (Cat. No. 95CH35807), Bar Harbor, ME, USA, 22-23 May, 1985)
- [8] C.D. Blitt (Ed.), <u>Monitoring in Anesthesia and Critical Care Medicine</u>, New York, Churchill-Livingstone, 1985
- [9] Zlatkis A., Pretorius V., "Preparative Gas Chromatography", Wiley, NY, 1971
- [10] Dorsch J.A., Dorsch S.E., "<u>Understanding Anesthesia Equipment: Construction, Care and Complications</u>", Third edition, Chapter 16: Gas Monitoring, Williams & Wilkins
- [11] White F.A., "Mass Spectrometry in Science and Technology", Wiley, NY, 1968
- [12] Roboz J., "Introduction to Mass Spectrometry", Interscience, NY, 1968
- [13] Rao C.N.R., "Chemical Applications of Infrared Spectroscopy", Academic, NY, 1964
- [14] Considine D. M., "Van Nostrand's Scientific Encyclopedia", Fifth edition, VNRC, 1976
- [15] Eiceman G.A., Karpas Z., "Ion-Mobility Spectrometry", CRC press, 1994
- [16] Eiceman G.A., Shoff D.B., et al., "Ion Mobility Spectrometry of Halothane, Enflurane, and
- [17] Giese W., "Experimentelle Beiträge zur kenntis von elektrischen Leitungsvermögen der Flammengase", Ann. Physik, 17:1-41, 236-257, 519-550, 1882
- [18] Puulmalainen P., "Method for Detection of Foreign Matter Contents in Gases", U.S. Patent No. 5,047,723, Sep 10, 1991
- [19] Katto T., Paakanen H., Karhapaa T., "Detection of CWA by Means of Aspiration Condeser Type IMS", Environics Oy, Mikkei, Finland, Technical Report
- [20] Rosenblatt R., Sacristán E., et al, "Application of Ion Mobility Analysis Method to Surgical Anesthetic Gas Monitoring"
- [21] Sacristán E., Solis A., "A Swept-Field Aspiration Condenser as an Ion Mobility Spectrometer", IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, submitted
- [22] Interim Report on Gas-Sensor Apparatus, CONTRAVES-Environics internal report.
- [23] Leithold, Louis, Calculus with Analytic Geometry, 5th ed., Harper & Row, NY, 1986

APÉNDICE A: Leyes de los gases

A.1. Presión

La presión se define como la fuerza que ejerce un gas por unidad de área:

$$P = F/A$$

La presión atmosférica se refiere a la presión ejercida por la atmósfera sobre la superficie de la tierra, y varía según las condiciones climáticas y la altura de la región donde se mide. El promedio de presión a nivel del mar se utiliza como referencia y se le asigna una unidad atmosférica (1 atm). En la tabla A.1 se dan algunas equivalencias entre unidades de presión.

	atm	mmHg	Pa	lb/in²
1 atmósfera	1	760	1.013×10^{5}	14.7
1 milímetro de mercurio a 0°C	1.316×10^{-3}	1	133.33	0.01934
l pascal	9.896 x 10 ⁻⁶	7.501 x 10 ⁻³	1	1.45 x 10 ⁻⁴
1 libra por pulgada cuadrada	6.805 x 10 ⁻²	51.71	6.895×10^3	1

Tabla A.1. Relaciones entre diversas unidades de presión.

A.2. Ley de Boyle-Mariotte

A temperatura constante, el volumen de una muestra de gas varía inversamente con la presión y la relación es lineal:

$$PV = constante$$

A.3. Leyes de Gay-Lussac

A.3.1. Primera, o Ley de Charles

Cuando se calienta determinado volumen de un gas, manteniendo constante la presión, el gas se dilata. Por cada grado celsius que se eleve la temperatura, el volumen aumenta aproximadamente 1/273 (este valor varía muy poco de gas a gas) de su valor primitivo (el valor a 0°C).

Si denominamos al volumen primitivo de un gas por Vo, a la fracción 1/273 como A, y a la temperatura en grados centígrados como C, tendremos:

$$V = Vo + (AC)Vo = Vo (1 + AC)$$

Además de predecir el comportamiento del gas cuando éste se calienta, la ecuación anterior también describe correctamente lo que sucede cuando se enfría: el volumen disminuye A veces su valor primitivo por °C que disminuya la temperatura.

Si designamos la temperatura absoluta (en grados Kelvin), podemos escribir:

$$T = C + 273 = C + 1/A$$

 $C = T - 1/A$
 $V = Vo (1 + AT - 1) = VoAT$

O en su forma mas general,

$$V/T = constante$$

Esto significa que el volumen de una muestra de gas varía directamente con la temperatura absoluta si la presión se mantiene constante (la constante de proporción, Avo, depende de la cantidad de gas presente y la presión a la que se encuentre sujeta).

A.3.2. Segunda, o Ley de los Volúmenes en Combinación

Los volúmenes de gases que se encuentran en combinación, ya sea simplemente mezclados o producidos por una reacción química, pueden expresarse en proporciones de números enteros sencillos a temperatura y presión constantes.

A.4. El principio de Avogadro

La explicación de la ley anterior fue propuesta por Amadeo Avogadro en 1811. El principio de Avogadro establece que los volúmenes iguales de todos los gases a la misma temperatura y presión contienen el mismo número de moléculas. El número de moléculas contenido en una cantidad de sustancia equivalente a su peso molecular (1 mol de sustancia) se ha determinado experimentalmente como 6.0220943 x 10²³, y se conoce como el número de Avogadro (N_A).

De acuerdo a este principio, un mol de gas, al tener un número definido de moléculas, debe ocupar el mismo volumen que un mol de otro gas, ambos medidos bajo las mismas condiciones de temperatura y presión, y se denomina como volumen molar de un gas. A 273.15 K (0°C) y una atmósfera de presión, este volumen equivale a 22.414 litros. Para la mayoría de los gases la desviación de este ideal es de menos del uno por ciento. Si n es el número de moles de un gas, entonces podemos escribir:

$$V / n = constante$$

A.5. Ley de Amontons

La presión de un gas confinado en un recipiente (es decir, con un volumen constante) aumenta de forma lineal cuando la temperatura se eleva:

$$P/T = constante$$

A.6. Ley de Dalton de las presiones parciales

A.6.1. Difusión

Se denomina como difusión a la disolución o mezcla íntima y homogénea de dos cuerpos distintos en contacto debida únicamente a las fuerzas moleculares. Los gases que no reaccionan entre sí, al ponerse en contacto, se difunden sin producir aumento de la temperatura y cada uno de ellos conserva sus características. Lo mismo sucede con los vapores y las mezclas entre éstos y con gases.

A.6.2. Ley de Dalton

Cuando en un recipiente se introducen gases o vapores que no reaccionan entre sí y con masas libres de líquido, la presión ejercida por la mezcla es igual a la suma de las presiones parciales de todos los gases y/o vapores presentes en ella.

La presión parcial de un componente se define como la presión que ejercería éste si fuera el único gas o vapor presente en el volumen considerado:

$$PTOTAL = Pa + Pb + Pc + ...$$

Por otro lado, la proporción del numero de moles de un componente al número total de moles se denomina fracción molar (X) del componente:

$$XA = nA / NTOTAL$$

$$1 = XA + XB + XC + \dots$$

Desde este punto de vista la fracción de la presión total ocasionada por un gas A (su presión parcial) está dada por su fracción molar:

$$PA = XA * PTOTAL$$

A.7. Ley de los gases ideales

Combinando las leyes anteriores se puede obtener una relación que describe las diferentes variables que afectan a un gas. Usando

$$PV = constante$$
, $V / T = constante$ $y V / n = constante$

podemos escribir,

$$V = nT / P * constante$$

Esto último puede hacerse ya que para cada igualdad individual se consideró a los demás parámetros como constantes, y por tanto formaban parte de las constantes que denominamos como constante1, constante2 y constante3. Si denominamos a la nueva constante producida como R, podemos escribir:

$$PV = nRT$$

Esta ecuación se conoce como la ecuación de estado para un gas ideal, donde P es la presión a la cual está sometido el gas, V su volumen, T su temperatura, n el número de moles que contiene, y R es la constante de los gases, equivalente a 0.082056 litros * atm / (K * mol). También es necesario mencionar que el número de moles, n, puede expresarse como n = m / M, donde m es la masa de la muestra y M es el peso molecular del gas.

A.8. Los gases reales

Las leyes de los gases presentadas anteriormente describen el comportamiento de un gas ideal, definido por la teoría cinética. Bajo condiciones ordinarias de temperatura y presión, los

gases reales siguen aproximadamente las leyes de un gas ideal. Sin embargo, estas leyes no se cumplen a bajas temperaturas y/o altas presiones. Esto se debe a la compresibilidad del gas, y ésta a su vez varía de acuerdo a dos factores:

- a) Fuerzas intermoleculares de atracción. La teoría cinética desprecia las atracciones intermoleculares para los gases ideales, pero éstas existen y son las que mantienen juntas a las moléculas de un gas cuando éste se licúa. Tales fuerzas tienden a reducir el volumen del gas y en este aspecto aumentan la presión. Esto causa que PV / RT tienda a ser menor que n.
- b) Volumen molecular. La teoría cinética considera despreciable el volumen que ocupa cada molécula de un gas, y esto no es así realmente. Al aplicar presión (o reducir el volumen de alguna otra forma), lo que disminuye es el espacio intermolecular, no el tamaño de las moléculas, el cual se puede decir que se mantiene constante. Este factor causa que PV / RT tienda a ser mayor que n.

A.8.1.a Ecuación de van der Waals

Los dos factores mencionados en la sección anterior actúan juntos para determinar la compresibilidad de un gas y su efecto puede ser compensado matemáticamente. En 1873, Johannes van der Walls modificó la ecuación de estado de un gas ideal para tomar en cuenta estos fenómenos:

$$(P + n^2 a / V^2) * (V - nb) = nRT$$

donde a es una constante que se emplea para tomar en cuenta el efecto de atracción intermolecular, y b es otra constante que se usa para tomar en cuenta el efecto del tamaño molecular. Estas constantes se determinan experimentalmente y son diferentes para cada gas.

- [1] Douglas M. Casidine, ed., "Van Nostrand's Scientific Encicolpedia", 5th ed., VNR, 1976
- [2] Charles E. Mortimer, "Chemistry". 5th ed., Wadsworth Publishing Co., California, EU, 1983

APÉNDICE B: Gases y Vapores

B.1. Gases

B.1.1. Oxígeno

El oxígeno utilizado corresponde al oxígeno diatómico (O₂) como el que se encuentra en el aire. Es un gas incoloro, inodoro e insípido, de densidad un poco superior a la del aire. Se combina fácilmente pero no con el flúor. Constituye aproximadamente el 21% del aire que se respira y es fundamental para el metabolismo.

B.1.2. Nitrógeno

Es muy abundante en la naturaleza, libre o combinado. Constituye aproximadamente cuatro quintas partes del aire y forma compuestos complejos en los organismos vegetales y animales. Es un gas incoloro, inodoro e insípido. Se caracteriza por su apatía o indiferencia para la combinación debido a la energía de sus enlaces, por lo que es popular como gas de arrastre. No arde ni mantiene la combustión.

B.1.3. Oxido Nitroso

El óxido nitroso no existe libre en la naturaleza. Es un gas incoloro de sabor y olor dulces que se conoce también con el nombre de gas hilarante o gas de la risa, ya que provoca la risa en algunas personas al respirarlo. Es muy oxidante y es capaz de mantener la combustión del carbón, azufre, fósforo, etc. con mayor energía que el aire. Sin embargo, no es respirable por períodos prolongados y se usa como anestésico secundario y en el laboratorio para lograr bajas temperaturas.

B.1.4. Bióxido (dióxido) de carbono

También conocido como anhídrido carbónico, constituye un pequeño porcentaje de la composición del aire y es producto (de la respiración) de animales, plantas, y la combustión de sustancias carbonadas. Es un gas incoloro, inodoro e insípido, mas denso que el aire y moderadamente soluble en agua. No es combustible ni comburente. No es venenoso en pequeñas cantidades pero si su proporción es superior al 20% en el aire respirado impide que el CO2 de la sangre se desprenda y que la hemoglobina fije el oxígeno en su lugar.

B.2. Los agentes anestésicos

Los agentes anestésicos (ciclopropano, halotano, éter di-etil, etc.) son gases inertes no metabólicos o vapores de líquidos los cuales, al ser inhalados, producen una depresión en la excitabilidad del tejido que es reversible y no tóxica [1]. Por un lado deben diferenciarse de los anestésicos locales por razones farmacológicas, bioquímicas y fisiológicas, y por otro, de hipnóticos tales como los barbitúricos, narcóticos como la morfina, y tranquilizantes como la cloropromazina.

La respuesta bioquímica a la inhalación de los agentes anestésicos no es la misma para todos, pero puede dividirse en dos grandes grupos [2]. El primero representa aquellos efectos debidos a la acción directa del agente sobre las membranas celulares, portadores de la membrana celular, sistemas enzimáticos celulares, etc. El segundo cubre aquellos efectos de alteración de la ventilación pulmonar, de la irrigación sanguínea de los órganos, de las tensiones gaseosas del tejido, del nivel hormonal circulatorio, etc., cada uno de los cuales tiene repercusiones a nivel metabólico. La mayoría de estas repercusiones son indirectas y pueden ser ilustradas por seis diferentes situaciones que pueden ocurrir durante la anestesia, cada una asociada con cambios metabólicos:

- 1. Algunos agentes se asocian con el incremento, mediado por el hipotálamo, de la actividad en el sistema nervioso simpático. Una consecuencia de esto es el aumento del nivel sanguíneo de sustancias metabólicamente activas, tales como la epinefrina. Otro efecto secundario es una glicogenólisis inducida que contribuye a una hiperglicemia (aumento del nivel de glucosa en la sangre) aunque los agentes anestésicos no son la única causa de ello.
- 2. Los agentes anestésicos inhalados pueden también estar asociados con la secreción reflexiva de hormonas metabólicamente activas (además del aumento de epinefrina). El efecto de los agentes sobre el sistema nervioso simpático y la actividad hormonal y su consecuente aumento del metabolismo, es una de varias razones por las cuales la anestesia no se relaciona con la baja en el consumo de oxígeno a pesar de una actividad somática disminuida.
- 3. Durante la anestesia ocurren cambios en la tensión gaseosa de los tejidos que resultan en la alteración del metabolismo. El cambio más importante es la disminución en la tensión de oxígeno que ocurre bajo la acción de algunos anestésicos. Esta caída en raras ocasiones se debe a una oxigenación alveolar o arterial disminuida, y en la mayoría de los casos se debe a un flujo decreciente de sangre en los tejidos (menor gasto cardíaco, hipotensión arterial, vasoconstricción periférica, etc., aisladas o combinadas). Como resultado del poco oxígeno, se da un aumento en los niveles de ácido láctico sanguíneo, evidencia de que no se puede mantener la relación normal entre la difosforidina nucleótida oxidada y la reducida a nivel tejido. Además, esta falta de ventilación alveolar puede causar aumentos en la tensión de bióxido de carbono. De hecho, la acidósis respiratoria (retención de bióxido de carbono) ocurre con mayor frecuencia en la anestesia moderna que la hipoxia, pues es más fácil oxigenar que remover bióxido de carbono.
- 4. Las consecuencias metabólicas de la operación quirúrgica y el trauma que conlleva la anestesia, se suman a los efectos bioquímicos que por si sola tiene la anestesia. Con frecuencia es dificil disociar las consecuencias metabólicas de una intervención de los efectos de la anestesia si se hace un estudio metabólico durante la operación y la anestesia en lugar de hacerlo únicamente durante la anestesia.
- 5. Si el paciente entra en shock durante la anestesia, especialmente si el shock es de tipo hemorrágico, los efectos metabólicos del shock se añaden, y acentúan, el efecto metabólico de la anestesia.
- 6. Durante la anestesia la función renal disminuye, en especial el flujo sanguíneo renal y la filtración glomerular. Cuánto disminuyen es función del tipo y profundidad de la anestesia. Estos cambios se suman a la alteración del metabolismo observable al detener los mecanismos excretores renales. Otros efectos vasculares renales se acentúan por la elevación en la secreción de aldosterona y hormona pituitaria antidiurética bajo ciertos tipos de anestesia.
- 7. La temperatura corporal también se ve afectada y cambia (asciende y/o desciende) durante la anestesia, con las consecuencias bioquímicas que resultan y que son especialmente prominentes si se permite el desarrollo de una hipotermia.

En la actualidad, se utilizan principalmente cinco agentes anestésicos halogenados volátiles (VHAs) con estructuras moleculares similares, basadas principalmente sobre un alcano o éter de dos a tres carbones, fluoradas y cloradas: Halotano, Isofluorano, Enfluorano, Desfluorano y Sevofluorano. Durante uso clínico, solo uno de ellos debe ser administrado al paciente [3].

B.2.1. Los agentes anestésicos halogenados inhalables volátiles (VHAs)

Los agentes anestésicos que se manejan en la presente investigación son hidrocarburos que contienen halógenos superiores (los cuales tienen siete electrones en su última capa, lo cual los hace propensos a capturar un electrón y formar iones negativos). En general su potencia es mayor dependiendo del halógeno que contengan, en el siguiente orden creciente (el cual también refleja potenciales de ionización decrecientes):

Por otro lado, la presencia de hidrógeno aumenta la potencia grandemente y disminuye el potencial de ionización.

Todos los VHAs son hidrocarburos acíclicos o alifáticos (es decir, en su estructura atómica no se forman cadenas cerradas). Todos tienen átomos de flúor adheridos a sus carbones y por tanto se pueden clasificar como fluorocarbones. Estos se caracterizan por su gran estabilidad o inactividad química (mayor a su análogo hidrocarburo) que heredan gracias al flúor, la cual les permite resistir a los agentes químicos más potentes.

Todos, excepto el Halotano son éteres. En general, los éteres son compuestos formados por dos radicales, iguales o diferentes, unidos por un átomo de oxígeno. Las propiedades de los éteres con radicales derivados de alcanos (hidrocarburos saturados) se pueden resumir como sigue:

- 1) Con excepción del éter-dimetil, el cual es un gas, son líquidos volátiles e inflamables, mas ligeros que el agua.
- 2) Son relativamente inactivos químicamente, pero con un enlace C-O-C débil debido a los 2 pares de electrones no compartidos por el oxígeno.
- 3) Forman productos de substitución al reaccionar con cloro y bromo.
- 4) Se descomponen en ésteres al ser calentados en presencia de ácidos fuertes.
- 5) Tienen bajo punto de ebullición debido a que no se asocian por enlace de hidrógeno.
- 6) Son incoloros, de olor agradable, poco solubles en agua.

Algunas de estas propiedades se modifican gracias a la presencia de los halógenos en los agentes anestésicos. Por ejemplo, como hemos mencionado, el flúor le da una estabilidad mucho mayor al VHA que su análogo éter hidrocarburo.

Para nombrar a los VHAs éteres primero hay que determinar de que alcano se obtuvieron los dos radicales (o directamente el nombre de los radicales):

	Alcano	Radical	
CH ₄	Metileno	Metilo	CH ₃
C₂H ₆	Etileno	Etilo	C ₂ H ₅

Posteriormente se le asigna un número a los carbones, desde el enlace libre del radical hacia afuera. Se escriben entonces en orden alfabético los nombres de los halógenos presentes en cada radical, empezando con el radical más grande, y utilizando prefijos si hay más de un átomo de un halógeno dado (di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, etc.), indicando con números los carbones a los

cuales están ligados, y añadiendo al final de cada serie el nombre del radical (sin la -o final). Finalmente, se agrega la palabra 'éter'.

Por otro lado, el Halotano es simplemente un etano halogenado; es decir, es un etano con halógenos en lugar de algunos de sus hidrógenos. Para nombrarlo se utiliza un procedimiento análogo al que se explica para los éteres, con la diferencia de que no hay radicales. Simplemente se agrega, después de la indicación de los halógenos, la palabra 'etano'. La posición de los hidrógenos no se menciona en el nombre de ningún VHA, ya que se sabe de antemano que están presentes en todos los enlaces del alcano original que no se substituyen por un halógeno. Los nombres de todos los VHAs se incluyen en la tabla B.1.

B.3. Parámetros importantes de los anestésicos

B.3.1. Presión de vapor saturado (SVP)

Al colocar un vapor anestésico de los que se discuten en esta sección en un recipiente cerrado a una presión de una atmósfera y a temperatura ambiente (20°C), éste se encuentra en su forma líquida. Algunas de sus moléculas escapan de su superficie como vapor y entran en el espacio por encima de él. A una temperatura dada, se establece un equilibrio entre las moléculas en estado líquido y aquellas en estado de vapor. La fase gaseosa está saturada cuando contiene todo el vapor que puede para esa temperatura. Las moléculas de vapor en estas condiciones ejercen una cierta presión de vapor sobre las paredes del recipiente, y a ésta se le denomina como la presión de vapor saturado (SVP) para esa temperatura.

B.3.2. Punto de ebullición

La temperatura a la cual la presión de vapor se iguala a la presión atmosférica, y a la cual todo el agente anestésico pasa de su fase líquida a su fase gaseosa se conoce como punto de ebullición.

B.3.3. Concentración de vapor

La concentración de un vapor puede medirse como una relación de la cantidad presente en fase gaseosa a la cantidad total (en porcentaje de volumen), y puede ser calculada con la ayuda de la Ley de Dalton (Apéndice A.3.4.2) como una fracción de la presión parcial del agente anestésico:

Concentración [Vol. %] = presión parcial del vapor / presión atmosférica total * 100 %

B.3.4. Concentración mínima alveolar (MAC)

La concentración mínima alveolar es una medida de la cantidad mínima de agente anestésico que debe disolverse en la sangre para lograr que la presión parcial alveolar se encuentre en equilibrio con la presión parcial arterial.

La concentración mínima alveolar de un agente anestésico inhalado es aquella concentración que produce parálisis temporal (anestesia) en un 50% de los pacientes que son operados quirúrgicamente, y se usa como una medida de la profundidad de la anestesia. Se expresa comúnmente en porcentaje de volumen de gas alveolar a una atmósfera de presión,

aunque es mejor relacionarlo con presión parcial pues es ésta la que, en el cerebro, es responsable de la profundidad de la anestesia.

Este parámetro puede variar con la edad del paciente y otros factores, como condición de salud y/o presencia de otros agentes anestésicos.

B.3.5. PMAC1

Es la presión parcial de un agente anestésico inhalado a una concentración de 1 MAC.

B.3.6. Gravedad específica

Para un líquido dado, la gravedad específica se define como la razón de la densidad del líquido a la densidad del agua a una temperatura dada. Para un gas se define como la razón de la densidad del gas a la densidad del aire a una temperatura y presión específicas.

B.3.7. Coeficiente de partición

- a) Sangre / Gas: Es una medida de la solubilidad del gas en sangre, y determina qué tan rápidas pueden ser las fases de inducción / recuperación de la anestesia y qué tan flexible es el control de la profundidad de ésta. Entre más pequeño sea el coeficiente, menos solubilidad tiene el agente, y más rápida y fácil de controlar puede ser la inducción.
- b) Lipido / Gas: En muchas ocasiones se utiliza aceite de oliva como el lípido y es una medida de la potencia de un anestésico. Esto se basa en la teoría de Myer-Overton [1], la cual plantea que entre mayor sea la solubilidad de un agente anestésico en un lípido o aceite, mayor será la potencia de éste. Esto se ve directamente reflejado en el MAC, el cual debe ser menor entre más potente sea el anestésico.
- c) Tejido / Gas: Generalmente para esta propiedad se da el coeficiente de partición para cerebro / gas pero también puede determinarse para músculo / gas y/o tejido graso / gas. Determina que tan rápido puede eliminarse el agente anestésico del cuerpo, ya que refleja la solubilidad de éste en los tejidos. Entre más soluble, más tarda en eliminarse.
- d) Componente / Gas: Describe la solubilidad del agente anestésico en elementos tales como tuberías de plástico, polímeros u otro material, y proporciona una medida de cuánto se degradan éstos en presencia del anestésico. Entre más soluble, más activo es en este sentido.

B.4. Características del agente anestésico inhalado ideal [4]

- 1) Estabilidad molecular: No debe alterarse su estructura molecular en presencia de luz, medios alcalinos o cal sodada (utilizada como colector de CO2 en sistemas cerrados). Debe conservarse estable, preferentemente libre de conservadores, y debe tener una larga vida útil que permita su almacenamiento en diversas condiciones climáticas.
- 2) No explosivo: No debe formar mezclas inflamables o explosivas con el aire, oxígeno u óxido nitroso.
- 3) Alta Potencia: Debe tener una potencia anestésica considerable que permita su uso con altas concentraciones de oxígeno.
- 4) Baja solubilidad en sangre: Debe tener una baja solubilidad en sangre para que la inducción y subsecuente recuperación sean lo más rápidas posible. Esto también permite que sea mas flexible el control de la profundidad de la anestesia.
- 5) Aroma no desagradable y no irritante: Debe tener un aroma agradable y no irritante que permita una inducción suave por inhalación, sobre todo en pacientes pediátricos.

- 6) No tóxico: No debe ser metabolizado por el organismo y debe de estar libre de efectos tóxicos que alteren el funcionamiento de ciertos órganos, aún en condiciones de exposición constante (crónica) a dosis pequeñas, como es el caso para el personal del quirófano.
- 7) Efectos secundarios mínimos: Los efectos secundarios en el sistema respiratorio y/o cardiovascular deben ser mínimos.
- 8) Efectos reversibles en el sistema nervioso central (CNS): Los efectos del agente anestésico sobre el CNS deben ser reversibles en cualquier momento y no debe existir actividad estimulante asociada. Debe proveer un cierto grado de analgesia (ausencia de dolor) así como hipnosis.
- 9) Interacciones con otros medicamentos: No deben existir interacciones adversas con otros medicamentos ni deben sensibilizar al corazón las quetocolaminas.

B.5. Características de los agentes anestésicos inhalados reales [4], [5]

En la tabla B.1. se resumen las características químicas y fisicas de los agentes anestésicos inhalables halogenados y del anestésico secundario N2O.

- [1] Dluzewski, Halsey and Simmonds, "Membrane interaction with general and local anesthetics: A review of molecular hypotheses of anesthesia", Molecular aspects of medicine, 6:459-573, 1983
- [2] Adriani J., "The Chemistry and Physics of Anesthesia", 2nd edition, Charles C. Thomas, Springfield, 1972
- [3] Rosenblatt R., Sacristán E., et al, "Preliminary Feasability Study of Anesthetic Agent Identification from Ion Mobility Spectra Using a Neural Network"
- [4] Whitten, Elmore and Latson, "Desflurane: A review", Progress in anesthesiology, february 1993
- [5] Product information, courtesy of Abbot Laboratories, Maruishi Pharmaceutical Co.

Característica	Desflyorano	Enfluorano	
Año de inicio de uso clínico	1988	1972	
Fórmula Estructural	F H F	Cl F F H-C-C-O-C-H F F F	
Fórmula	CHF2OCHFCF3	CHF2OCF2CHFCI	
Nombre químico	1,2,2,2-tetrafluoroetil	2-cloro-1,1,2-trifluoroetil	
•	difluorometil éter	difluorometil éter	
Peso molecular [g/mol]	168.04	184.5	
Presión de saturación de vapor (SVP) a 20°C [mmHg]	669	175	
	$\ln SVP = C1 - C2/T + C3*\ln T$	$\log SVP = A + B/T$	
	C1 = 25.501486	A = 7.967	
Fórmula para calcular la SVP	C2 = -4086.975586	B = -1678.4	
[mmHg]	C3 = -0.889732	$T = {^{\circ}C} + 273.16$	
	$T = {}^{\circ}C + 273.16$		
Concentración de vapor saturado a 20°C y 1 atm [vol %]	87	23	
	5.2 a 10% en 100% O2	1.68% en 100% O2	
MAC a 1 atm [vol %]	1.7 a 7.5% en 60% N2O	1.17% en 30% N2O	
		0.57% en 70% N2O	
PMAC [mmHg]	46 a 55	12.8	
Punto de ebullición a 1 atm [°C]	22.8	56.5	
Gravedad específica del agente líquido a 25°C	1.45	1.517	
	Sangre/Gas: 0.424	Sangre/Gas: 1.91	
Coeficientes de partición a 37°C	Aceite de oliva/Gas: 18.7	Aceite/Gas: 98.5	
	Cerebro/Gas: 0.54	Cerebro/Gas: 2.48	
Coeficientes de partición a 25°C	Polipropileno: 6.7 Polietileno: 16.2 Latex: 10.4 a 19.3 Polivinilo: 34.7	Hule conductivo: 74 Polivinilo: 120	
Características físicas	No inflamable, no explosivo, incoloro	No inflamable, no explosivo, incoloro, aroma suave y dulce.	
Estabilidad	Estable con iluminación normal, estable químicamente aún en presencia de ácidos fuertes. Ligera degradación en cal sodada a alta temp (80°C)	Estable en presencia aún de luz ultravioleta, y no se descompone en presencia de cal sodada.	
Materiales que no ataca	Acero inoxidable, latón, latón niquelado, aluminio, aluminio anodizado, cobre y berilio.	Aluminio, estaño, latón, cobre y acero (sin embargo ataca fuertemente al VITON™).	
Efectos secundarios	Mínimamente biotransformado por el hígado (menos del 0.02% de metabolitos urinarios). Sin toxicidad renal.	2.4% de metabolitos urinarios.	

Característica	Halotano	Isofluorano	
Año de inicio de uso clínico	1956	1981	
Fórmula Estructural	C1 F H-C-C-F Br F	F Cl F	
Fórmula	CF3CHBrCl	CF3CHClOCHF2	
Nombre químico	2-bromo-2-cloro-1,1,1-	1-cloro-2,2,2-trifluoroetil	
	trifluoroetano	difluorometil éter	
Peso molecular [g/mol]	197.3	184.5	
Presión de saturación de vapor (SVP) a 20°C [mmHg]	243	238	
Fórmula para calcular la SVP [mmHg]		$\log SVP = A + B/T$ $A = 8.056$ $B = -1664.58$ $T = ^{\circ}C + 273.16$	
Concentración de vapor saturado a 20°C y 1 atm [vol %]	32	31	
MAC a 1 atm [vol %]	0.75% en 100% O2	1.15% en 100% O2	
	0.29% en 70% N2O	0.5% en 70% N2O	
PMAC [mmHg]	5.7	8.7	
Punto de ebullición a 1 atm [°C]	50.2	48.5	
Gravedad específica del agente líquido a 25°C	1.87	1.496	
Coeficientes de partición a 37°C	Sangre/Gas: 2.5 Aceite/Gas: 224 Cerebro/Gas: 4.75	Sangre/Gas: 1.43 Aceite/Gas: 90.8 Cerebro/Gas: 2 Agua/Gas: 0.61	
Coeficientes de partición a 25°C	Plásticos: alto	Hule conductivo: 62 Hule de butil: 75 Poliuretano: 1.4 Polietileno: 2 Poliolefina: 1.1 Polivinilo: 110 Butil acetato: 2.5	
Características físicas	No inflamable, no explosivo	Incoloro, transparente, inflamable, y con aroma poco irritante, etéreo	
Estabilidad	Instable al ser expuesto a la luz y forma ácidos volátiles. Se le agrega Timol (0.01%) como estabilizador y se almacena en recipientes polarizados. Es estable en presencia de cal sodada.	Estable en condiciones normales de iluminación, incluso en presencia de luz ultravioleta. No se degrada en presencia de cal sodada.	
Materiales que no ataca	Cobre	Aluminio, estaño, latón, cobre y acero (sin embargo ataca fuertemente al VITONTM).	
Efectos secundarios	Causa un alto porcentaje de metabolitos urinarios (15 a 20%) y puede causar afecciones hepáticas serias en algunos casos.	0.7% de metabolitos urinarios.	

Característica	Sevofluorano	Oxido Nitroso	
Año de inicio de uso clínico	1990		
Fórmula Estructural	F H F-C-F F-C-O-C-H H F-C-F F	N ≡ N = O	
Fórmula	CFH2OCH(CF3)2	N2O	
Nombre químico	fluorometil 2,2,2-trifluoro-1- trifluorometil etil éter	Oxido Nitroso	
Peso molecular [g/mol]	200.05	44	
Presión de saturación de vapor (SVP) a 20°C [mmHg]	157	39000	
Fórmula para calcular la SVP [mmHg]	log SVP = A + B/T A = 8.086 B = -1726.68 T = °C + 273.16		
Concentración de vapor saturado a 20°C y 1 atm [vol %]	21		
MAC a 1 atm [vol %]	1.7% en 100% O2 0.66% en 70% N2O	115	
PMAC [mmHg]	12.9		
Punto de ebullición a 1 atm [°C]	58.6	-88	
Gravedad específica del agente líquido a 25°C	1.520 a 1.525	1.226 (a -88°C)	
Coeficientes de partición a 37°C	Sangre/Gas: 0.63 a 0.69 Aceite de oliva/Gas: 47 a 54 Cerebro/Gas: 1.15 Agua/Gas: 0.36	Sangre/Gas: 0.46 Cerebro/Gas: 0.51	
Coeficientes de partición a 25°C	Hule conductivo: 14 Hule de butil: 7.7 Polivinilo: 17.4 Polietileno: 1.3		
Características físicas	No inflamable, no explosivo, transparente, incoloro, con aroma no irritante	Incoloro, aroma dulce	
Estabilidad	Estable incluso en presencia de luz ultravioleta. No se degrada en presencia de ácidos fuertes ni calor. Se degrada en presencia de absorbedores de CO2.	Altamente inactivo y estable	
Materiales que no ataca	Acero inoxidable, latón, latón niquelado, latón cromado, aluminio, cobre-berilio		
Efectos secundarios	3% de metabolitos urinarios. Puede afectar pacientes con hígado delicado.	0.004% de metabolitos urinarios en el hígado (excelente)	

APÉNDICE C: Acerca de la radioactividad

C.1. Radioactividad

El fenómeno de la radioactividad, descubierto por Becquerel en 1896, se refiere a la desintegración espontánea del núcleo de un átomo con la consiguiente emisión de radiación.

C.2. Radiación

Existen tres tipos importantes de radiación: a) Rayos alfa, b) Rayos beta y c) Rayos gama.

C.2.1. Radiación alfa

Las partículas alfa son núcleos de helio (He^{2+}) , es decir, dos protones y dos neutrones (número atómico Z=2 y masa atómica A=4), emitidos por un núcleo radioactivo por una reacción nuclear espontánea de la forma

$$^{A}X(Z) \rightarrow ^{A-4}X(Z-2) + ^{4}He$$
,

es decir, la pérdida de una partícula alfa deja un átomo residual con cuatro unidades de masa atómica menos y dos unidades de número atómico menos.

La energía total producida por la transición es transferida a ambos núcleos producto, por lo que un espectro de partículas alfa en función de la energía mostraría una serie de picos individuales, cada uno correspondiente a la transición de una sola partícula alfa. La ley de conservación de la energía y el momento dicta que la energía debe ser compartida por ambos núcleos producto, con el núcleo hijo ($^{A-4}$ X (Z-2)) moviéndose en sentido contrario a la partícula alfa emitida. Si $E\alpha$ y $M\alpha$ son respectivamente la energía cinética y la masa de la partícula alfa, y E_R y M_R son respectivamente la energía cinética y la masa del núcleo producto, el cambio en la energía es $Q=E\alpha+E_R$, y la energía cinética de la partícula alfa emitida es $E\alpha=Q$ [M_R / ($M\alpha+M_R$)].

Casi todos los elementos con núcleos que emiten partículas alfa se encuentran en la parte de la tabla periódica con números atómicos superiores al del plomo (82), aunque hay algunos con números menores. Generalmente solo con mayor masa existe la energía suficiente necesaria para emitir partículas alfa.

Por otro lado, como los neutrones no tienen carga y los protones tienen carga positiva, los rayos alfa tienen carga positiva y pueden ser ligeramente desviados por campos eléctricos y

magnéticos. Tienen una velocidad definida, del orden de 5 a 7% de la velocidad de la luz, dependiendo del núcleo que los emite. Su *rango* (de penetración), definido como la distancia que recorren en un medio homogéneo antes de ser absorbidos, es el mas pequeño entre todos los tipos de emisiones.

C.2.2. Radiación beta

Los rayos beta son electrones, con velocidades muy cercanas a las de la luz. La emisión de una partícula beta por un núcleo deja a al átomo residual con el mismo número de masa pero con un número atómico mayor (emisión de una partícula beta negativa o negatrón) o menor (emisión de una partícula beta positiva o positrón, o captura de un electrón orbital) en una unidad. Los rayos beta son aproximadamente cien veces mas penetrantes que los rayos alfa.

Dado que el núcleo atómico contiene solo protones y neutrones, las partículas beta deben ser creadas justo en el momento de la emisión, de la misma manera en que los fotones se crean en el momento de una emisión de radiación electromagnética. Gracias a este proceso, la energía en reposo del electrón, $e = m_e c^2$, debe consumirse en la radiación. Toda energía extra se le imparte a la partícula beta como energía cinética.

Las transiciones nucleares se realizan entre estados de energía discretos, diferentes entre sí por una cantidad de energía discreta Wo, por lo que se esperaría tener una energía total Wo en la transición. Sin embargo, la energía total (de reposo + cinética) de una partícula beta emitida es continua sobre un rango $m_e c^2 < W <$ Wo en lugar de ser una sola energía Wo. Esta distribución como función de la energía o el momento se conoce como espectro de rayos beta, y su forma depende del signo de la partícula (positivo o negativo), la energía Wo, y de que tan posible es la transición.

Por otro lado, la energía y el momento deben conservarse, y la teoría de Fermi nos explica lo que sucede. La energía no transmitida a la partícula beta y su número cuántico de spin, 1/2, son transferidos a una partícula sin masa denominada neutrino (o en su caso, antineutrino).

C.2.3. Radiación gama

Los rayos gama son fotones o cuantos de radiación electromagnética emitidos cuando un núcleo atómico sufre una transición de un estado energético alto a uno bajo. Su energía varía de 10^4 a 10^7 eV y son aproximadamente 10,000 veces mas penetrantes que los rayos alfa. Por ejemplo, rayos gama emitidos por treinta gramos de radio pueden ser observados aún después de atravesar treinta centímetros de hierro (Rutherford).

Normalmente se producen rayos gama como parte de una reacción nuclear cuando un núcleo atómico queda en un estado excitado o durante una transición isomérica. También pueden ser emitidos después de una emisión alfa o beta, o en una captura orbital de un electrón. En

sentido estricto solo se denominan rayos gama a los fotones emitidos por transiciones en el núcleo atómico. Los rayos gama poseen toda la energía de la transición con la que se asocian. Un espectro de rayos gama en función de la energía muestra picos individuales asociados cada uno con una transición gama.

C.3. El americio

Descubierto en 1945 y nombrado en honor del continente americano, el americio posee un número atómico de 95 y un peso atómico, para su isótopo más estable, de 243. Es uno de los elementos transuránidos y forma parte de los actínidos. Todos sus isótopos son radioactivos y tienen que ser producidos sintéticamente. Tiene una configuración electrónica

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^7 6s^2 7s^2$$

y un radio atómico Am4+ de 0.85 Å y Am3+ de 1.00 Å.

Los isótopos conocidos del americio son:

Número Atómico (A)	Vida Media	Tipo de Emisión *
238	1.86 hrs	Κ, γ
239	12 hrs	Κ, α, γ
240	50 hrs	Κ, γ
241	460 años	α, γ
242	100 años	Κ, β⁻, γ
243	8000 años	α, γ

^{*} K corresponde a la captura de un electrón orbital

El ²⁴¹Am es el isótopo que se utiliza como fuente de partículas alfa para la ionización en el desarrollo de esta tesis. Es el segundo isótopo mas longevo del americio y su desintegración radioactiva puede apreciarse en el diagrama siguiente, correspondiente a la serie del neptunio, a la cual pertenece.

Elemento (A)	Símbolo	Tipo de Radiación	Vida Media
Curio (96)	²⁴⁵ Cm	α	9300 años
Plutonio (94)	²⁴¹ Pu	β	13.2 años
Americio (95)	²⁴¹ Am	α	460 años
Neptunio (93)	²³⁷ Np	α	2.2 x 10 ⁶ años
Proactinio (91)	²³³ Pa	β	27.4 días
Uranio (92)	²³³ U	α	1.62 x 10 ⁵ años
Torio (90)	²²⁹ Th	α	7340 años
Radio (88)	²²⁵ Ra	β	14.8 días
Actinio (89)	²²⁵ Ac	α	10 días
Francio (87)	²²¹ Fr	α	4.8 min
Astato (85)	²¹⁷ At	α	$1.8 \times 10^{-2} \text{ seg}$
Bismuto (83)	²¹³ Bi	αyβ	$4.2 \times 10^6 \text{ seg}$
Polonio (84) [96%]	²¹³ Po	α	$4.2 \times 10^6 \text{ seg}$
Talio (81) [4%]	²⁰⁹ Tl	β	2.2 min
Plomo (82)	²⁰⁹ Pb	β	3.3 hrs
Bismuto (83)	²⁰⁹ Bi	Ninguna	Estable
(Producto Final)			

- [1] Schumilovskii, N.N. and L.V. Melttser, "Radioactive Isotopes in Instrumentation and Control", Pergamon Press, NY, 1964
- [2] D.N. Trífonov y V.D. Trífonov, "Como fueron descubiertos los elementos químicos", Editorial MIR, Moscú, 1984
- [3] Isaac Asimov, "Asimov's New Guide to Science", Basic Books, NY, 1984
- [4] Douglas M. Casidine, ed., "Van Nostrand's Scientific Encicolpedia", 5th ed., VNR, 1976

APÉNDICE D: Diseño del sistema mezclador / dosificador de anestesia

D.1. Introducción

La investigación sobre la cual esta tesis se fundamenta se realizó utilizando un sistema dosificador de anestesia y gases portadores que se diseñó para ese fin [1]. Durante el curso de esta nueva etapa de la investigación se reconstruyó el sistema para poder obtener una nueva base de datos que se basará en las técnicas de muestreo que se determinaron como óptimas a partir de la presente investigación, y se modificó de tal manera que pudiera servir como prototipo para la construcción de una máquina de anestesia totalmente automática para uso clínico.

D.2. El sistema completo

El sistema mezclador / dosificador de anestesia completo que se propone se muestra en la figura D.1. Es realizable en dos modos de operación: manual y automático [2]. En ambos casos, la concentración del gas portador se elige manipulando los controladores de flujo digitales (sección D.2.1) por medio de una computadora, y el flujo así conseguido se hace pasar a una barra SelectaTecTM (sección D.2.3) donde se mezcla con el agente anestésico. Si se desea que el sistema sea manual, lo cual se consigue con solo mover un switch, el usuario selecciona la concentración del VHA mediante perillas (potenciómetros) conectados a la computadora a través de un convertidor analógico-digital. La perilla de concentración de los vaporizadores (la cual es manual) se abre a concentración máxima. El gas a la salida de la barra será entonces la mezcla portadora saturada al 100% con vapor anestésico. Esta se diluye posteriormente mediante una derivación del flujo sin anestésico, en proporciones reguladas por la computadora y los controladores digitales. En este caso, los vaporizadores no funcionan como fueron diseñados (vaporizadores de bypass variable) sino como vaporizadores de flujo medido, en los cuales no existe un control de concentración por medio de una perilla (sección D.2.2). En el caso automático, las concentraciones de gases y anestésicos se leen desde un archivo de concentraciones previamente creado y almacenado en la computadora. Posteriormente el flujo obtenido, ya sea en modo manual o automático, pasa a ser humectado mediante la misma técnica de bifurcación de flujo.

Finalmente, la mezcla de gas se analiza paralelamente mediante el sensor y un espectrómetro de masa y los resultados se almacenan, junto con la lectura de la presión y la temperatura existentes al momento de realizar la medición.

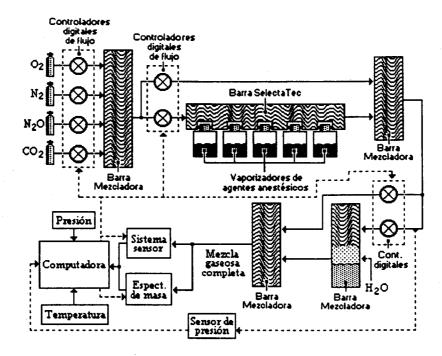


Figura D.1. Esquema del sistema mezclador / dosificador de gases.

D.2.1. Controladores digitales de flujo

Los controladores de flujo son válvulas o reguladores digitales (y por lo tanto adecuadas para el control por computadora) que están calibrados para cada gas (oxígeno, nitrógeno, bióxido de carbono y óxido nitroso) y que regulan el flujo de cero a un litro por minuto (lpm) a una presión ajustable de cero a cincuenta libras por pulgada cuadrada (psi).

Se utilizan además en el sistema dos controladores para aire de cinco lpm, de cero a tres psi, los cuales se usan para regular mezclas de gases. Aunque no se encuentren calibrados para una mezcla en particular (no es posible tener un regulador calibrado para cada mezcla posible), se usan solo para controlar flujos que se bifurcan (un controlador en cada rama) de manera que todos los flujos divididos son afectados en la misma proporción y por lo tanto tienen una salida (en porcentaje) igual a la que se escogió.

D.2.2. Vaporizadores de agentes anestésicos

En esta investigación se utiliza un vaporizador modelo TEC-4 de OhmedaTM calibrado para Enfluorano, y tres vaporizadores TEC-5, calibrados para Halotano, Isofluorano y Sevofluorano, respectivamente. Estos permiten escoger una concentración de anestésico de cero a cinco por ciento (excepto en el caso del enfluorano, que permite llegar hasta siete por ciento). Para el desfluorano se cuenta con un vaporizador TEC-6 de OhmedaTM, el cual permite preparar concentraciones de hasta dieciocho por ciento [3].

Los vaporizadores TEC-4 y TEC-5 son del tipo de *bypass variable* (figura D.2.a) en los cuales se puede seleccionar la concentración de agente anestésico que se desea mediante una perilla graduada. Están calibrados a 22°C para oxígeno como gas portador a 5 lpm, a una presión de 760 mmHg.

El modelo TEC-6 es considerablemente diferente a los demás. Este vaporizador mantiene una temperatura interna estable de aproximadamente 39°C y una presión interna de aproximadamente 1500 mmHg, y está calibrado para oxígeno como gas portador a 5 lpm.

Las variaciones en el flujo del gas portador no afectan considerablemente la concentración del agente anestésico a la salida del vaporizador. No así con el tipo de gas portador. Variaciones en la mezcla afectan la concentración de VHA a la salida. Lo mismo sucede con variaciones de presión y temperatura (excepto en el caso del TEC-6), por lo cual se hace evidente la necesidad de un espectrómetro de masa para asegurar que es lo qué se está midiendo durante la investigación y como se relaciona con la respuesta del sensor.

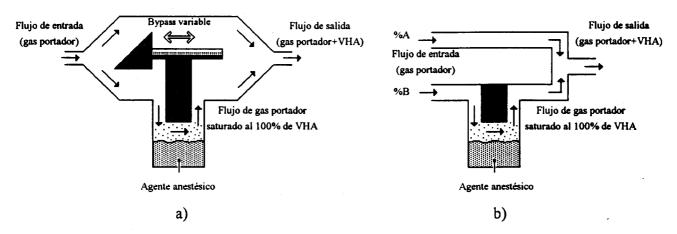


Figura D.2. Diagrama del funcionamiento de un vaporizador: a) de bypass variable y b) de flujo medido.

Existe otro tipo de vaporizadores conocidos como vaporizadores de flujo medido los cuales utilizan dos flujos de gas portador (figura D.2.b). Uno pasa por el tanque del vaporizador, donde se satura de anestésico, y el otro diluye al primero en una proporción regulada por el usuario. Es decir, mediante reguladores externos para cada flujo uno mismo realiza la función de bypass variable en este tipo de vaporizadores, con la ventaja de que se elimina el problema de temperatura, presión y tipo de gas portador. La desventaja es que se requieren cálculos matemáticos para determinar la concentración del agente, así como la proporción que deben guardar los reguladores para cada flujo.

D.2.3. Barra SelectaTecTM

Es una barra de ensamble (desarrollada por OhmedaTM) la cual permite la instalación de varios (generalmente tres) vaporizadores de la línea TEC (o compatibles) al mismo tiempo en una máquina de anestesia, y que mediante un mecanismo y una serie de seguros no permite que más de uno se encienda a la vez (sistema InterLockTM) [3]. El flujo del vaporizador en funcionamiento pasa desde éste a la barra, y de ahí hacia el sistema principal.

D.2.4. Barras Mezcladoras

Son simplemente recipientes tubulares o rectangulares en donde diferentes gases y/o vapores pueden ser introducidos, mezclándose ellos mismos por difusión (apéndice A, sección A.5.1). Pueden, además, contener estructuras en su interior que ayuden a este proceso.

D.2.5. Sensor (condensador de aspiración diferencial de primer orden)

Este sensor se describe en la sección 3.1.

D.2.6. Espectrómetro de masa

El espectrómetro de masa utilizado para este sistema es del tipo de cuadripolo, como el que se describe en la sección 2.4.2. Además, viene interfasado a una computadora, con la cual se pueden especificar sus parámetros y recoger los resultados.

D.2.7. Conectores / Válvulas de conección [4]

- Conectores NPT: Los conectores NPT tienen cuerda cónica y se utilizan para conectar equipo fijo. En nuestro caso utilizamos todos estos conectores en 1/8.
- Conectores de Compresión: Los conectores de compresión tienen una cuerda y una contracuerda (para apretarla) que se utilizan para conecciones a tubería. En su interior poseen un sujetador que 'agarra' al tubo, sujetándolo y evitando fugas. Existe una marca especial de conectores de compresión, SWAGELOCK ™, que tiene un excelente control de calidad y que utilizamos en este sistema. Todos los conectores que empleados son de 1/8 a tubería de 1/4.
- Conectores tipo 'barb': Estos son conectores 'dentados' para la fácil y rápida conección y desconección de mangueras. Los 'dientes' agarran la manguera, la cual entra a presión y no permiten que la manguera se desconecte sola. Estos se utilizan únicamente con mangueras flexibles. Todos los conectores de este tipo utilizados son de 1/8.

• Conectores DISS o CGA: Este tipo de conectores son especiales para los tanques de gas (oxígeno, nitrógeno, etc.) y tienen una forma distinta y única para cada uno de ellos. Se requiere uno para cada tanque de gas empleado.

D.2.8. Tubería y mangueras [4]

Se utiliza tubería flexible de teflón de 1/8 para nuestro sistema en donde es posible, ya que es relativamente económica y versátil. En donde se requiere por razones de presión se utiliza tubería de cobre de 1/8. Las mangueras utilizadas para la administración de los gases son mangueras de hule reforzadas.

- [1] Sacristán E., "Ion-Mobility Method for Inhalation Anesthesia Monitoring", Ph.D. Dissertation, Worcester Polythechnic Institute, Worcester, MA, 1993.
- [2] Dorsch J.A., Dorsch S.E., "<u>Understanding Anesthesia Equipment: Construction, Care and Complications</u>", Third edition, Chapter 16: Gas Monitoring, Williams & Wilkins.
- [3] Ohmeda, Manuales técnicos del equipo.
- [4] Catálogos diversos de equipo para el manejo de gases.