

Seminario de Química Orgánica

Miércoles 6 de octubre de 2021, 13 h

AULA VIRTUAL DQO: <https://zoom.us/my/go.aula04> - Clave: exactaszo

“Calibración multivía empleando señales espectroscópicas moduladas por gradiente de pH. Su aplicación en el análisis de sistemas complejos”

Dra. Gabriela Ibáñez

Dpto. de Química Analítica. Instituto de Química Rosario (IQUIR) (UNR-CONICET)

El empleo de señales espectroscópicas moduladas por pH, en combinación con algoritmos quimiométricos apropiados, posibilita el desarrollo de nuevas metodologías para la determinación de compuestos de interés en matrices altamente interferentes, empleando calibraciones multivías. Para compuestos pH dependientes es posible introducir una dimensión adicional a datos espectroscópicos pudiendo obtenerse datos de segundo y tercer orden. Estos datos poseen la denominada “ventaja de segundo orden”, una propiedad que permite la cuantificación de los analitos en muestras complejas que presentan compuestos potencialmente interferentes que no han sido contemplados en la etapa de calibración.

En los sistemas analizados se emplearon datos de segundo orden (matrices de fluorescencia sincrónica-pH, **MFS-pH**) y de tercer orden (matrices de excitación- emisión-pH, **MEE-pH**), con un número balanceado de sensores en todos los modos, para el desarrollo de métodos analíticos aplicados a la cuantificación de analitos en matrices complejas (orina, tejidos animales y vegetales de consumo). Estos métodos fueron obtenidos minimizando la complejidad instrumental y el tiempo de análisis, y siguiendo los principios de la química analítica verde. Los espectros sincrónicos y las MEEs se obtuvieron empleando un espectrofluorómetro de barrido rápido, que permite registrar los datos en un corto período de tiempo. Para la generación del gradiente de pH se utilizaron dos estrategias: a) técnica de inyección en flujo (FIA), b) generación *in situ* por hidrólisis de glucono-Delta-lactona. Los datos fueron analizados con diferentes algoritmos quimiométricos: cuadrados mínimos parciales multidimensionales (N-PLS) y su variante desdoblada (U-PLS) asociados a trilinealización residual (RTL), análisis paralelo de factores (PARAFAC) y resolución multivariada de curvas acoplada a cuadrados mínimos alternantes (MCR-ALS).