



XI Congreso Argentino **QUÍMICA ANALÍTICA**

Corrientes / Argentina 2021

LIBRO DE RESÚMENES

XI Congreso Argentino de Química Analítica
30 de Noviembre al 03 de Diciembre 2021
Corrientes - Argentina
Modalidad Virtual

Congreso Argentino de Química Analítica

XI Congreso Argentino de Química Analítica : libro de resúmenes / compilación de Sergio Sebastián Samoluk ; César Adrián Lezcano ; coordinación general de Juan Daniel Ruíz Díaz ; dirigido por Roberto Gerardo Pellerano ; editado por Melisa Jazmin Hidalgo; Roxana María Itatí Goyechea ; Adriana Lucía Moresi ; Diana Corina Fechner y Michael Pérez Rodríguez ; ilustrado por Romina Paola Romero. - 1a ed compendiada. - Paso de la Patria : Roberto Gerardo Pellerano, 2022.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-987-88-5110-5

1. Química Analítica. I. Samoluk, Sergio Sebastián, comp. II. Lezcano, César Adrián, comp. III. Ruíz Díaz, Juan Daniel, coord. IV. Pellerano, Roberto Gerardo, dir. V. Hidalgo, Melisa Jazmin, ed. VI. Romero, Romina Paola, ilus. VII. Título.

CDD 543.1

XI CONGRESO ARGENTINO
DE QUÍMICA ANALÍTICA
LIBRO DE RESUMENES

30 de Noviembre al 03 de Diciembre 2021
Corrientes - Argentina

Espectroscopía de plasma inducido por láser para identificar el origen geográfico de miel

Diana Fechner^{a*}, Tiago Varão Silva^b, Maurilio Nespeca^b, Alan Lima Vieira^b, José Gomes Neto^b, Dário Santos Júnior^b, Roberto Pellerano^a y Edilene Ferreira^b

a. Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA), UNNE-CONICET, Corrientes, Argentina.

b. São Paulo State University – UNESP, Chemistry Institute of Araraquara, São Paulo, Brazil.

* e-mail: fechnerdiana@exa.unne.edu.ar

La miel es un alimento natural valorado en todo el mundo por sus valores nutricionales y terapéuticos, por lo que su autenticación de acuerdo con el origen geográfico es una garantía de las propiedades genuinas de dicha miel ¹. En este trabajo, se evaluó la espectroscopía de plasma inducida por láser asistida por descarga de chispas (LIBS-SD) para la certificación de origen geográfico de la miel. Se estudiaron 49 muestras compuestas de miel multifloral recolectadas de cuatro provincias de la región Nordeste de Argentina en los años 2015 y 2016: 11 muestras de Formosa (F), 10 de Chaco (CH), 14 de Corrientes (C) y 14 de Misiones (M). Los espectros se adquirieron en un sistema LIBS equipado con un láser Q-Switched Nd: YAG 1064 nm Big Sky Ultra 50, un haz de fibra óptica, y cuatro espectrómetros HR2000+, con una resolución óptica de 0,1 nm y un rango espectral de 200 nm a 630 nm. El pulso láser de 8 ns fue con energía de potencia máxima de 50 mJ. Todo el sistema está acoplado a un dispositivo de descarga de chispas (SD) ². Se midieron 25 réplicas por muestra y se eliminaron los espectros atípicos, luego los espectros restantes fueron evaluados por PCA, excluyéndose los que mostraban valores fuera de los límites de confianza (95%). Los espectros útiles de cada muestra se ajustaron a la línea de base, se normalizaron y se promediaron.

Con los espectros promedio de cada muestra se realizaron preprocesamientos espectrales (centrado en la media, corrección de línea de base por filtro Whittaker, primera y segunda derivadas, suavizado Savitzky-Golay, corrección de dispersión multiplicativa, ponderación generalizada de mínimos cuadrados (GLSW), autoescalado) para los métodos de clasificación PLS-DA y SVM ^{3,4}. La combinación de suavizado, GLSW y centrado en la media proporcionó el mayor número de clasificaciones correctas ambos métodos. Dado que el GLSW atenúa las variables espectrales que varían en la misma clase, las variables correlacionadas con las clases presentan mayor peso en el modelado. Por lo tanto, este preprocesamiento fue el más importante para proporcionar clasificaciones correctas. Además, el suavizado Savitzky-Golay redujo el ruido espectral, hizo que los picos de emisión fueran más definidos y aumentó el ajuste del modelo. PLS-DA y SVM pudieron clasificar los cuatro grupos de miel por provincia de origen: el modelo SVM ($v = 0.5$, $\gamma = 10^{-6}$) proporcionó el 100% de clasificación correcta para el conjunto de validación externa, y el modelo PLS-DA (9 LV) proporcionó el 94% de clasificación correcta. Por otra parte, se utilizó el método PLS-DA para la visualización e interpretación de la separación de los cuatro grupos de miel. Los resultados fueron concordantes con la composición elemental de las muestras obtenida por asignación de líneas de emisión espectral según la base de datos NIST LIBS. Las muestras de M mostraron el menor contenido de N, mientras que las de C y F mostraron el mayor contenido de este elemento, sugiriendo que la miel de C y F presenta un mayor contenido de proteína. Además, las muestras de C mostraron el mayor contenido de Ca, y un contenido medio de K y Fe. Las muestras de CH se distinguieron de las demás por sus niveles más altos de Cu y niveles promedio de Mn.

Como conclusión, la autenticación del origen geográfico de la miel argentina se evaluó mediante LIBS-SD y herramientas quimiométricas. El preprocesamiento espectral apropiado proporcionó un modelo SVM capaz de clasificar la miel con precisión según sus regiones productoras, siendo el N el elemento más importante para la discriminación. Las contribuciones complementarias de Ca, K, Cu, Fe y Mn también fueron importantes para la discriminación geográfica de la miel. Teniendo en cuenta la posibilidad de medir N y la importancia de este elemento para la discriminación geográfica de la miel, los métodos propuestos colocan a LIBS en una posición destacada en comparación con las técnicas atómicas convencionales, proporcionando además un análisis rápido, limpio y directo, con un dispositivo de bajo costo para el control de la calidad de los alimentos.

1. X. Zhou, M. P. Taylor, H. Salouros and S. Prasad, *Sci. Rep.*, 2018, 8, 1–11 / 2. L. Vieira, T. V. Silva, F. S. I. de Sousa, G. S. Senesi, D. S. Júnior, E. C. Ferreira and J. A. G. Neto, *Microchem. J.*, 2018, 139, 322–326. / 3. M. Barker and W. Rayens, *J. Chemom.*, 2003, 17, 166–173. / 4. C.-C. Chang and C.-J. Lin, *Neural Comput.*, 2001, 13, 2119–2147.