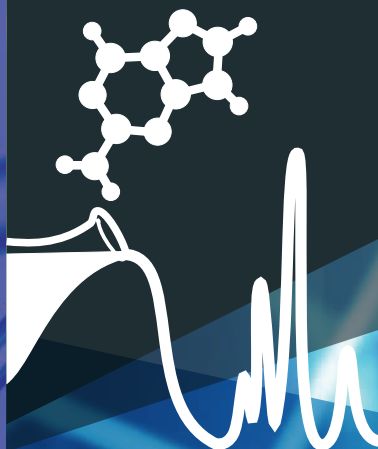


e-book ISBN 978-987-688-210-1



XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Néstor M. Correa y Luis A. Otero

Compiladores

16 al 19 de Mayo de 2017

Ciudad de Villa Carlos Paz, Córdoba, Argentina

UniRío
editora



ESTUDIO ESTRUCTURAL POR ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DEL PLAGUICIDA IMAZALIL Y SU DETECCIÓN EN BAJAS CONCENTRACIONES EMPLEANDO UN NUEVO SUSTRATO SERS-ACTIVO

Díaz Mirón Gonzalo, Chemes Doly María, Álvarez Rosa María Susana

Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, UNT. Ayacucho 471, San Miguel de Tucumán, Tucumán, Argentina
gonzalodm20@gamil.com

Motivación: La gran variedad de plaguicidas que se usan actualmente para proteger muchos cultivos en áreas extensas incrementa el riesgo de que los seres humanos y el ambiente sean seriamente afectados. Especialmente, los residuos que dejan los plaguicidas en los productos alimenticios de origen agrícola constituyen un problema de consideración a nivel global. Nuestro interés es el de desarrollar un método analítico que permita detectar esos residuos de manera rápida y segura, antes que el producto llegue al consumo humano. Es por ello que el presente trabajo consiste en la detección del fungicida imazalil por medio de la Espectroscopía Raman Aumentada en Superficie (SERS, por sus siglas en inglés), empleando un sustrato novedoso.

Resultados: Los estudios aquí presentados se inician con la caracterización vibracional del imazalil por las espectroscopias Raman normal e Infrarrojo, respaldada por cálculos mecánico-cuánticos al nivel B3lyp/6-311+g(2df,p). La asignación confiable de las principales bandas de vibración de las moléculas constituye el punto de partida de rigor para la posterior interpretación de los espectros SERS. Los mismos fueron adquiridos usando un sustrato SERS-activo, construido a base de un soporte de Si cristalino con nanohilos de ZnO crecidos en la superficie por un método hidrotérmico y la posterior deposición de nanopartículas de Ag crecidas a distintos tiempos de exposición a radiación UV (1). Se determinaron las mejores condiciones de síntesis de estos sustratos en base a la magnitud de las intensificaciones Raman observadas. La sensibilidad de los sustratos se determinó empleando diluciones de imazalil en concentraciones de 10^{-4} a 10^{-7} M (aprox. 300 a 0.30 ppm), las cuales están en el rango del Límite Máximo de Residuo permitido en las frutas cítricas para este fungicida (5 ppm). Se demostró además la eficiencia para detectar al fungicida agregado al extracto de cáscara limón.

Conclusiones: Se confirmó la capacidad de detección del fungicida por el sustrato diseñado. El método de análisis empleando resulta sencillo y práctico para hacerlo extensivo a análisis de rutina. Además, la variación en la intensidad de una banda de estiramiento C-H (2877 cm^{-1}), sugiere la viabilidad de un análisis semicuantitativo de la concentración del fungicida en solución acuosa.

En base a la asignación vibracional completa y a la evaluación de las bandas que experimentaron efecto SERS, se propone que el imazalil se adsorbe sobre la superficie nanoestructurada a través del par de electrones libres del átomo de N del anillo imidazol, aunque el anillo bencénico cloro-sustituido también demuestra interacción con el sustrato.

Referencias

1) Huang J., Chen F., Zhang Q., Zhan Y., Ma D., Xu K., Zhao Y., ACS Appl. Mater. Interfaces., **2015**, 7, 5725-5735.