



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Integración de la metodología de superficie de respuesta (RSM) y Análisis de componentes principales (PCA) como herramienta de optimización para óptodos basados en membranas poliméricas de inclusión, diseñados para Hg(II), Cd(II) y Pb(II)

García-Beleño Jeniffer, Rodríguez de San Miguel Eduardo.

Departamento de Química Analítica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, (UNAM), 04510 Ciudad de México, México
jgarciab@comunidad.unam.mx

Resumen del trabajo:

Se realizó la optimización de la composición de óptodos basados en membranas poliméricas de inclusión (PIM) y sus tiempos de exposición a disoluciones de iones metálicos (Hg(II), Cd(II) y Pb(II)) utilizando dos cromóforos diferentes, difeniltiocarbazona (ditizona) y 1-(2-piridilazo) -2-naftol (PAN). Se evaluaron cuatro factores: cantidades de cromóforo (0,06 a 1 mg), de triacetato de celulosa (25 a 100 mg) y de plastificante (25-100 mg), así como el tiempo de exposición (20-80 min)). Los valores de las funciones de deseabilidad de Derringer se emplearon como variables de respuesta para realizar la optimización obtenida de los resultados de tres procesos diferentes de tratamiento de datos espectrales: dos métodos de espectro completo (M1 y M3) y un método basado en bandas (M2). Los tres métodos diferentes se compararon utilizando un mapa de calor de los coeficientes y dendrogramas de las reducciones del análisis de componentes principales (PCA) de sus funciones de deseabilidad. Se recomienda el método de procesamiento M3, realizado utilizando los valores de score de los dos primeros componentes principales después de restar los espectros normalizados de las membranas antes y después de la complejación, ya que generó diferencias más perceptibles entre las PIMs en el Diseño de Experimentos (DoE). Los valores óptimos fueron tiempos de 35 a 65 min, y las cantidades fueron: 0,53 mg a 1,0 mg de cromóforos, 34,4 a 71,9 mg de plastificantes y 62,5 a 100 mg de triacetato de celulosa, según el ion metálico. Además, el método arrojó los mejores resultados en términos de interpretabilidad y un cambio de color fácilmente discernible, por lo que se recomienda como un método de optimización novedoso para este tipo de óptodo basado en PIMs.

McDonagh, C.; Burke, C.S.; MacCraith, B.D., *Chemical reviews* **2008**, 108, 400-422.

Murray, P.M.; Bellany, F.; Benhamou, L.; Bucar, D. K.; Tabor, A. B.; Sheppard, T. D., *Organic and Biomolecular Chemistry*, **2016**, 14, 2373-2384.

Kazemi, S. Y.; Hamidi, A. S.; Zolgharnein, J. *Journal of Analytical Chemistry*, **2014**, 69, 646-655.

Ferreira, S.L.C.; Dos Santos, W.N.L.; Quintella, C.M.; Neto, B.B.; Bosque-Sendra, J.M., *Talanta* **2004**, 63, 1064-1067.

Mang, D.y.; Abdou, A.B.; Njintang, N.Y.; Djiogue, E.J.M.; Loura, B.B.; Mbofung, M.C., *Journal of Food Measurement and Characterization* **2015**, 9, 495-507.

