

# **Espectroscopias láser en combinación con procedimientos quimiométricos: una nueva aproximación al análisis químico en sistemas complejos.**

**DIRECTORES:** Gustavo Ariel Pino (UNC) y Jorge Cáceres Gianni (UCM)

**FECHAS DEL CURSO:** Del 19 de febrero al 2 de marzo de 2018.

**PERFIL DEL ALUMNO:** Este curso está destinado a estudiantes de Doctorado, Maestría y Especialidades en Ciencias Químicas, Biología, Geología, Arqueología, Farmacia, Medicina y disciplinas asociadas, como así también estudiantes avanzados de los últimos años de Grado o Licenciaturas en las mismas áreas del conocimiento.

## **OBJETIVOS:**

Que los alumnos:

- 1) Obtengan una visión rigurosa, actualizada y panorámica sobre el estado del arte de algunas espectroscopías basadas en el uso de láseres con fuertes aplicaciones analíticas, desde sus fundamentos teóricos hasta sus múltiples. En particular el curso centrará la atención en las espectroscopias de plasma inducido por láser (LIBS, acrónimo del inglés Laser Induced Breakdown Spectroscopy), de Ionización Láser Resonante (REMPI, acrónimo del inglés Resonantly Enhanced Multiphoton Ionization) y Raman.
- 2) Adquieran conocimiento de las ventajas del tratamiento de datos por diversos métodos quimiométricos en aplicaciones analíticas de estas metodologías en diversos sistemas.
- 3) Alcancen una visión global de las múltiples aplicaciones de estas técnicas en la resolución de problemas de las Ciencias Químicas, Biológicas, Forenses, de la Salud, de los Alimentos y del medioambiente, tanto desde el punto de vista teórico como práctico.

## **PROGRAMA:**

### **Temario Teórico:**

Tema 1: Fundamentos de las espectroscopias Láser – Instrumentación Láser

Tema 2: Principios básicos de la espectroscopia LIBS. Aplicaciones analíticas de LIBS en mediciones medioambientales y en ciencias biológicas, de la salud, forense, de los alimentos y en seguridad alimentaria.

Tema 3: Principios básicos de la espectroscopia REMPI y su acople a GC-MS. Aplicaciones analíticas de GC-MS-REMPI en mediciones medioambientales y en ciencias biológicas, de la salud, forense, de los alimentos y en seguridad alimentaria.

Tema 4: Introducción a la Plasmónica. Espectroscopía incrementadas (Raman y Fluorescencia). Aplicaciones analíticas, sensores ópticos ultrasensibles en biología, ciencias de la salud y forense.

Tema 5: Diseño experimental y optimización de las condiciones experimentales. Análisis de las superficies de respuesta experimental. Calibración multivariante y análisis multicomponente. Evaluación de resultados analíticos mediante análisis de componentes principales y otros métodos multivariantes.

### **Prácticas Experimentales:**

Práctico Laboratorio 1: Adulteración de leche en polvo mediante LIBS

Práctico Laboratorio 2: Detección de contaminantes orgánicos aromáticos mediante REMPI-MS.

Práctico Laboratorio 3: Detección ultrasensible de moléculas biológicas mediante Raman.

Práctico Computacional 4: Análisis de los resultados de los prácticos 1-3 mediante metodologías quimiométricas.

#### **PROFESORADO:**

Gustavo Ariel Pino, UNC.

Jorge Cáceres Gianni, UCM.

Luis Vicente Pérez Arribas, UCM.

Eduardo Andrés Coronado, UNC.

#### **BREVE CV DE LOS PROFESORES DEL CURSO:**

##### **Gustavo Ariel Pino:**

Profesor Asociado del Dpto. de Físicoquímica de la Fac. de Ciencias Químicas en la Universidad Nacional de Córdoba y tiene Categoría I en el programa de incentivos para docentes investigadores. Dicta clases en asignaturas de la Lic. en Química, es profesor encargado de impartir la Química Física II con contenidos en el área de la química cuántica, espectroscopía, cinética y dinámica y en la Química Láser. Además, es Investigador Principal del CONICET, con lugar de trabajo en el INFIQC e integra el Consejo Directivo de este instituto y del Centro Láser de Ciencias Moleculares de la Universidad Nacional de Córdoba. Su área de trabajo es la Química Láser y sus aplicaciones en espectroscopía, dinámica y cinética de reacciones. Lleva a cabo estudios en haces moleculares de especies de interés biológico como son las bases del ADN y su interacción con cationes metálicos y protón. Así mismo, sus estudios involucran el efecto de la humedad relativa ambiente sobre reacciones de interés atmosférico como las del radical OH con Compuestos Orgánicos Volátiles. Su actividad de investigación ha dado como resultado la publicación de 43 artículos en revistas científicas indexadas en el JCR, todas ellas en el primer tercio (T1). En los últimos 5 años (2013-2017), ha publicado 20, todas T1, incluyendo *Angewandte Chemie Int. Ed.* y *J. Phys. Chem. Lett.* Ha presentado en un total de 69 trabajos a Congresos/Reuniones científicas nacionales e internacionales y ha participado como conferencista o expositor en 20 ocasiones. Ha dirigido 5 tesis doctorales, dos de ellas premiadas por la Asociación Química Argentina y la Asociación Argentina de Investigación en Físicoquímica y actualmente dirige otras 4 tesis doctorales y un posdoctorado. Es director de diversos proyectos nacionales e internacionales y es director Argentino del Laboratorio Internacional Asociado CNRS (Francia) – CONICET (Argentina), “Laboratorio de Estructura y reactividad de Moléculas, Iones y Radicales en fase gaseosa” (LEMIR). Ha participado en diversas comisiones de evaluación y de Consejos Directivos de varias instituciones. Participa activamente como revisor de publicaciones científicas indexadas de circulación internacional.

##### **Jorge Omar Cáceres Gianni:**

Profesor Titular de Universidad en el Área de Química Analítica en el Dpto. Química Analítica de la facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid, Imparte clases de Quimiometría en Química Analítica, Informática Aplicada a la Química y Areometría Analítica Avanzada. Su actividad investigadora ha dado como resultado la publicación de 90 artículos en revistas científicas indexadas en el JCR, situándose más del 98% de ellas en el primer tercio (T1). En los últimos 5 años (2013-2017), ha publicado más de 27 publicaciones JCR, todas en el primer tercio T1, ha presentado en un total de 64 Congresos/Reuniones científicas siendo el 90% de ellas de carácter internacional y he participado como ponente invitado en un total de 18 ocasiones. Además de las aportaciones al avance del conocimiento mediante el desarrollo de investigación básica, ha realizado una labor de transferencia del

conocimiento al sector productivo lo que se ha materializado en la obtención de 5 patentes, 1 de ellas internacional y en la firma de 2 contratos de investigación y proyectos de transferencia de tecnología con empresas (Convenios OTRI Art.83 LOU) habiendo sido investigador principal en todos ellos. En el periodo postdoctoral ha realizado diversas estancias de investigación y disfrutado de varias becas competitivas de las que cabe mencionar Beca CONICET 1998-2000 Becario pos-doctoral MEC España 2003-2008 e Investigador del Programa Ramón y Cajal UCM 2003-2006 Es miembro del editorial board of Journal of Chemistry, Journal applied and laser spectroscopy (JALS) y Journal of Sensor Network. así mismo es revisor de artículos para varias publicaciones científicas internacionales de gran prestigio: Nature Scientific Reports, Talanta, Journal of Analytical Atomic Spectrometry (JAAS), Applied Spectroscopy, Spectrochimica Acta part B, ect. Ha colaborado activamente en la formación alumnos de pregrado (mediante la dirección de 25 trabajos de fin de grado) y postgrado (dirigiendo 7 Trabajos de Fin de Master). Ha sido director de 5 tesis doctorales, 1 de ellas con Mención de Doctorado Europeo.

**Eduardo Coronado:**

Es director del grupo bio-nanoplasmónico e Investigador Principal del Instituto de Investigación Química Física de Córdoba (INFIQC) del Consejo Nacional de Investigación (CONICET) de Argentina y Profesor Asociado del Dpto. de Físicoquímica de la Fac. de Ciencias Químicas de la Universidad Nacional de Córdoba. Ha dirigido 5 tesis doctorales, 2 investigadores de CONICET y 1 becario posdoctoral. Actualmente dirige otras 2 tesis doctorales y 2 becarios posdoctorales. Ha publicado más de 60 publicaciones revisadas por pares, la mayoría de ellas en revistas de alto impacto como Nano Letters, ACS Nano, Nanoscale, J. of Phys. Chem. C y ha recibido más de 6900 citas de acuerdo con Scopus, siendo uno de sus trabajos sobre las propiedades ópticas de las nanopartículas de metal publicado en J. Phys. Chem. situado en el 6 ° lugar entre los 25 trabajos más citados en la historia de esta Revista. Es miembro del Editorial Board de J. Phys. Chem. desde 2015.

**Luis Vicente Pérez Arribas:**

Profesor Titular de Universidad adscrito al departamento de Química Analítica de la UCM. Imparte clases de Informática Aplicada a la Química y de Quimiometría en la Facultad de CC Químicas de la UCM. Coautor de diversos trabajos científicos relacionados con el empleo de técnicas cromatográficas para la determinación de compuestos orgánicos de interés ambiental y alimentario, dedicando especial atención a la preparación de muestras, preferentemente mediante extracción en fase sólida, análisis cromatográfico y aplicación de métodos estadísticos y quimiométricos. Director o codirector de 4 tesis doctorales, diez tesis de licenciatura, y numerosos trabajos de fin de carrera.