

Asesor: Dr. Gabriel Ramos Ortiz
Co - Asesor: Dr. José Luis Maldonado Rivera

Sinodales: Dr. José Norberto Farfán García
(Sinodal Externo – Facultad de Química UNAM, Secretario)

Dr. David Monzón Hernández
(Sinodal Interno, Vocal)

Dr. Gabriel Ramos Ortiz
(Asesor de Tesis, Presidente)

Tesis: **“MATERIALES ORGÁNICOS APLICADOS COMO SENSORES COLORIMÉTRICOS Y PLASMÓNICOS PARA LA DETECCIÓN DE METALES EN AGUA”**

Resumen:

En el presente proyecto de investigación se estudió una serie de moléculas orgánicas derivados de base de Schiff como sensores para la detección de metales. La motivación de este trabajo ha sido desarrollar sensores colorimétricos de metales en medios acuosos que combinen las propiedades de bajo costo, alta sensibilidad y alta selectividad. Una molécula orgánica (ligante) puede funcionar como un sensor colorimétrico, sí en su estructura molecular contiene una unidad receptora (encargada de coordinarse al metal) y un cromóforo, enlazados por un sistema π conjugado. Se estudiaron varios ligantes de base de Schiff cuya estructura favorece la coordinación química con los iones metálicos. La interacción de los ligantes denotados como L1, L2, L3, L4, L5, L6, L7 y S1 con iones metálicos se realizó mediante espectroscopía de absorción Ultravioleta-visible. Los resultados indicaron una excelente coordinación entre L1 y S1 con níquel y cobre, respectivamente, es decir, dichos sensores son capaces de detectar selectivamente iones de estos metales sin la interferencia significativa de otros iones.

El ligante L1, 4-chloro-2-[(3-(4-dimethylaminophenyl)-allylidenamino]phenol, fue validado como sensor colorimétrico de Ni^{2+} en solución acuosa. La adición de níquel a una solución de L1 en DMSO produjo un rápido cambio de color de amarillo a naranja, correspondiente a un gran desplazamiento hacia el rojo del pico de absorción de 435 a 480 nm. El efecto colorimétrico está acompañado de la presencia de un punto isosbético en el espectro de absorción, lo que indica que en realidad el corrimiento hacia el infrarrojo se debe a la aparición de una nueva banda de absorción indicativa de la coordinación sensor-metal. L1 exhibió un límite de detección para Ni^{2+} de 1×10^{-7} M medido por espectroscopía de absorción, mientras que el límite de detección colorimétrico (definido como el cambio de color detectado visualmente sin el apoyo de ningún instrumento) fue del orden de 5×10^{-6} M. La interacción entre L1 y otros iones metálicos biológicamente y ecológicamente relevantes como Hg^{2+} , Pb^{2+} , Co^{2+} , Cu^{2+} y Mn^{2+} , inducen cambios espectrales mínimos. Los resultados obtenidos muestran que la base de Schiff L1 funciona como un excelente sensor químico del ion Ni^{2+} con una alta selectividad y la capacidad para realizar la detección en el agua en un intervalo de 5.5-8 de pH.

La estructura molecular del sensor L1 puede ser modificada para inducir una respuesta colorimétrica diferente. Por ejemplo, al cambiar de 4 a 5 la posición del elemento cloro en anillo dimetilaminofenil la selectividad de coordinación de L1 cambia completamente. En este la nueva estructura resulta en 5-chloro-2-[3-(4-(dimethylaminophenyl)-allylidenamino]phenol y en este estudio se denota como S1, que funciona como un sensor colorimétrico. El sensor S1 muestra una coordinación favorable hacia Cu^{2+} y prácticamente ninguna interferencia con la presencia de otros iones de metales, como son, Cd^{2+} , Co^{2+} , Cr^{2+} , Fe^{3+} , Mg^{2+} , Ni^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+} , Mn^{2+} y Zn^{2+} . S1 exhibió cambios de color del amarillo al rosa con un límite de detección para Cu^{2+} de 1.25×10^{-7} M medidos por métodos espectroscópicos, mientras que a concentraciones muy bajas del orden de 2×10^{-6} M se pudieron observar cambios colorimétricos a simple vista. Experimentos de titulación de

mezclas de soluciones de L1 y Ni²⁺, así como de S1 y Cu²⁺, permitieron establecer la formación y geometría estequiométrica de los complejos S1 + Ni²⁺ y S1 + Cu²⁺.

Estos sensores pueden ser de utilidad en pruebas biológicas y ciencias ambientales en donde se requiere detectar iones de níquel y cobre. Finalmente, con la finalidad de ejemplificar la utilidad de estos sensores, también se demostró que S1 puede ser útil para la detección de iones de cobre a través del uso de la técnica de resonancia de plasmón superficial (SPR). Mediante un arreglo de SPR en la configuración de Kretschmann se detectó Cu²⁺ en soluciones acuosas al nivel de concentración de 1.5×10^{-6} M debido a los cambios en el índice de refracción en soluciones después de la formación de los complejos metálicos.