

CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO

Informe Científico¹

PERIODO ²: 2015-2016

1. DATOS PERSONALES

APELLIDO: PISTONESI

NOMBRES: MARCELO

Dirección Particular: Calle: Localidad: BAHÍA BLANCA

Dirección electrónica (donde desea recibir información, que no sea "Hotmail"):
mpistone@criba.edu.ar

2. TEMA DE INVESTIGACION

DESARROLLO MÉTODOS ANALÍTICOS PARA EL ANÁLISIS DE MUESTRAS
MEDIAMBIENTALES , BIOCOMBUSTIBLES Y ALIMENTOS

PALABRAS CLAVE (HASTA 3) Medioambiente Biocombustibles
Alimentos

3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

INGRESO: Categoría: ASISTENTE Fecha: 12/10/2005

ACTUAL: Categoría: INDEPENDIENTE desde fecha: 20/10/2015

4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA

Universidad y/o Centro: UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

Facultad:

Departamento: QUÍMICA

Cátedra: QUÍMICA AMBIENTAL

Otros: INQUISUR - CONICET

Dirección: Calle: AVENIDA ALEM N°: 1253

Localidad: BAHÍA BLANCA CP: 8000 Tel: 2914139172

Cargo que ocupa: PROFESOR ADJUNTO

5. DIRECTOR DE TRABAJOS (En el caso que corresponda)

Apellido y Nombres:

Dirección Particular: Calle: N°:

Localidad: CP: Tel:

Dirección electrónica:

¹ Art. 11; Inc. "e"; Ley 9688 (Carrera del Investigador Científico y Tecnológico).

² El informe deberá referenciar a años calendarios completos. Ej.: en el año 2017 deberá informar sobre la actividad del período 1°-01-2015 al 31-12-2016, para las presentaciones bianuales. Para las presentaciones anuales será el año calendario anterior.

.....
Firma del Director (si corresponde)

.....
Firma del Investigador

6. RESUMEN DE LA LABOR QUE DESARROLLA

Descripción para el repositorio institucional. Máximo 150 palabras.

Las actividades principales del proyecto radican en desarrollar e implementar métodos analíticos que permitan detectar y/o cuantificar diferentes sustancias para el análisis en muestras medioambientales, biocombustibles y alimentos de la región de Bahía Blanca y su zona de influencia.

Objetivos:

Medio ambiente: A partir del mes septiembre de 2015, el grupo de investigación de química ambiental de la UNS participa en un Acuerdo Marco Interdisciplinario con la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CIC), CORFO y INTA (Hilario Ascasubi) relacionado a la caracterización y control de ambientes acuáticos de la zona del valle inferior del río Colorado.

Biocombustibles: Se evalúan los parámetros de calidad de los biocombustibles donde el biodiesel se utiliza como aditivo. Se realizan estudios para observar la influencia de este aditivo, obtenido de diferentes materias primas, sobre las propiedades fisicoquímicas de mezclas biodiesel/diesel.

Alimentos: los métodos analíticos propuestos están dirigidos al análisis de muestras comerciales de origen agropecuario (polen, miel, propoleos, té, carnes) nacionales e internacionales. A partir de la información obtenida se analiza cuáles son los parámetros más significativos para la caracterización de las muestras comerciales.

7. EXPOSICION SINTETICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO.

Debe exponerse, en no más de una página, la orientación impuesta a los trabajos, técnicas y métodos empleados, principales resultados obtenidos y dificultades encontradas en el plano científico y material. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.

ALIMENTOS

Miel: se desarrolló un método electroforético sencillo CE-DAD para la caracterización de nanopartículas de plata (AgNPs) en función de su tamaño. Se analizaron muestras de AgNPs sintetizadas con miel (la cual actúa naturalmente como agente reductor y estabilizante). Los mejores resultados, evaluados en términos de tiempo de migración y área de pico. El trabajo fue enviado para su publicación a *Chromatographia*

Hamburguesas: el trabajo fue comparar dos metodologías analítica no invasivas ni destructivas para establecer el contenido de grasa en hamburguesas de pollo, utilizando espectroscopía de infrarrojo cercano, imágenes digitales y herramientas quimiométricas. Se analizaron 66 muestras de hamburguesa de pollo, obtenidas en comercios de la ciudad de Bahía Blanca, Argentina, de diferentes lotes y fabricantes. El trabajo fue enviado para su publicación a *Spectrochimica Acta Part A*

Té: el objetivo del trabajo fue estudiar el posible efecto del tipo de agua (red y surgente) en la liberación de fluoruro, aluminio y otros elementos (Cu, Zn, Cd, Na y K) en infusiones comerciales de té verdes y negros de Argentina. El trabajo fue enviado para su publicación a *Journal of Food Composition and Analysis*.

Polen: se desarrolló un método espectrométrico en el infrarrojo cercano (NIR) y herramientas quimiométricas para predicción de valores de humedad y proteínas totales en polen de abeja. Se procesaron 61 muestras de polen recolectado por abejas melíferas en la zona del Sudoeste Bonaerense. El trabajo fue enviado para su publicación a *Food Chemistry*.

Posteriormente se desarrolló un método espectrométrico simple, rápido y no destructivo, basado en el empleo de la espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIR) y herramientas quimiométricas de análisis multivariado (PLS), para la cuantificación del contenido de polifenoles totales, flavonoides, humedad, proteínas totales en polen de abejas de la región sudoeste de la provincia de Buenos Aires. El trabajo se encuentra en etapa de redacción.

MEDIOAMBIENTE

Estuario de Bahía Blanca: se desarrolló un trabajo empleando Espectroscopia de Fluorescencia Molecular para caracterizar la composición de la fracción fluorescente de la materia orgánica disuelta en muestras obtenidas en dos sitios (Galván y El Embudo) del Estuario de Bahía Blanca, recolectadas mensualmente desde abril del 2013 hasta mayo de 2014.

Río Colorado: desde septiembre de 2015, el grupo de investigación de química ambiental de la UNS participa en un Acuerdo Marco Interdisciplinario con la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CIC), CORFO (Corporación de Fomento del Valle del Río Colorado) y el Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria de la Nación (INTA Hilario Ascasubi) relacionado a la caracterización y control de ambientes acuáticos de la zona del valle inferior del río Colorado. Las actividades a desarrollar por el grupo de la UNS es el desarrollo de la investigación y realización de estudios tendientes a la determinación y control de los parámetros fisicoquímicos en canales de riego y drenaje a fin de mejorar la eficiencia del aprovechamiento del agua de riego y preservación del recurso hídrico del Valle Bonaerense del Río Colorado.

Biocombustibles: se diseñó un sistema para la determinación de glicerol en muestras de biodiesel. Comprende una extracción líquido – líquido del glicerol en muestras de biodiesel a través del sistema Flow-Batch con dispositivo de detección empleando piezoeléctricos para la determinación de glicerol en la muestra. Este sistema propuesto presenta grandes ventajas ya que no implica la utilización de reactivos y es ecológico. El trabajo fue enviado para su publicación a Talanta.

INCONVENIENTES GENERALES: Las dificultades que se presentaron durante este año, están relacionadas fundamentalmente por problemas económicos. El subsidio recibido sólo ha alcanzado para comprar lo estrictamente necesario, que en este caso son reactivos químicos e insumos de laboratorio. Esto implica que el avance de las investigaciones se lleven a cabo con el instrumental disponible, sin la posibilidad de adquirir nuevo equipamiento.

8. TRABAJOS DE INVESTIGACION REALIZADOS O PUBLICADOS EN ESTE PERIODO.

8.1 PUBLICACIONES. *Debe hacer referencia exclusivamente a aquellas publicaciones en las que haya hecho explícita mención de su calidad de Investigador de la CIC (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha mención no debe ser adjuntada porque no será tomada en consideración. A cada publicación, asignarle un número e indicar el nombre de los autores en el mismo orden que figuran en ella, lugar donde fue publicada, volumen, página y año. A continuación, transcribir el resumen (abstract) tal como aparece en la publicación. La copia en papel de cada publicación se presentará por separado. Para cada publicación, el investigador deberá, además, aclarar el tipo o grado de participación que le cupo en el desarrollo del trabajo y, para aquellas en las que considere que ha hecho una contribución de importancia, deberá escribir una breve justificación. Asimismo, para cada publicación deberá indicar si se encuentra depositada en el repositorio institucional CIC-Digital.*

SIMPLIFIED TEA CLASSIFICATION BASED ON A REDUCED CHEMICAL COMPOSITION PROFILE VIA SUCCESSIVE PROJECTIONS ALGORITHM LINEAR DISCRIMINANT ANALYSIS (SPA-LDA).

Autores: Diniz, P.H.G.D.; Pistonesi, M.F.; Alvarez, M.B.; Band, B.S.F.; Araújo, M.C.U. *Journal of Food of Composition and Analysis*. vol. 39, 103–110. (2015) ISSN: 0889-1575

Abstract: In this study, several possible approaches for simultaneous discrimination of teas based on a linear discriminant analysis with variables selected by the successive projections algorithm (SPA-LDA), featuring selection from the chemical composition according to variety (black or green tea) and geographical origin (Argentina or Sri Lanka), are explored. Chemical composition (moisture, ash, caffeine, fluoride, polyphenols, and 15 elements from both tea leaves and infusions) was used as input data for identification of the differentiating characteristics of tea samples. Thus, a strategy that allows tea discrimination using a reduced number of chemical parameters was developed. SIMCA (soft independent modeling of class analogy) and PLS-DA (partial least squares-discriminant analysis) were used along with SPA-LDA for comparison. The elemental fingerprint (chemical signature) can be used for identifying the variety and origin of the tea, and SPA-LDA provided the most successful result (100% correct classification), despite having selected just three chemical parameters (namely K, Al, and Mg). The result is extremely positive from the viewpoint of chemical analyses, because quantifications made using fewer elements naturally provide simpler, faster and less expensive methods.

USING ISPA-PLS AND NIR SPECTROSCOPY FOR THE DETERMINATION OF TOTAL POLYPHENOLS AND MOISTURE IN COMMERCIAL TEA SAMPLES.

Autores: Diniz, P.H.G.D.; Gomes.; Pistonesi, M.F.; Araújo, M.C.U. *Anal. Methods*, (2015),7, 3379-3384. ISSN 1759-9660.

Abstract: In this work is proposed a methodology for determining the content of total polyphenols and moisture in commercial tea samples by using near-infrared spectroscopy (NIRS) and Partial Least Squares (PLS) regression coupled with the Successive Projections Algorithm for interval selection (iSPA-PLS). For comparison, full-spectrum PLS and the Interval PLS (iPLS) were also used. Since the spectra are scattered and exhibit systematic variations on the baseline, standard normal variate transformation (SNV) and multiplicative scatter correction (MSC) were applied as data preprocessing methods. The number of PLS latent variables and the number of regions intervals were optimized according to the root mean square error of crossvalidation (RMSECV) and coefficient of determination (R^2 CV) in the calibration set. The predictive ability of the final model was evaluated in terms of root mean square error of prediction (RMSEP), coefficient of determination (R^2 Pred) and ratio performance deviation (RPDPred) in the external prediction set, which were not employed in the model-building process. For the determination of total polyphenols content, 10-iSPA-PLS with MSC preprocessing presented the best result with the smallest RMSEP (0.599 mg kg⁻¹), and the highest R^2 Pred (0.933) and RPDPred (3.863) values. For the determination of moisture content, 20-iSPA-PLS with MSC preprocessing achieved the best result with the smallest RMSEP (0.32 mg kg⁻¹), and the highest R^2 Pred (0.94) and RPDPred (4.08) values values. Thus, it can be concluded that the NIRS coupled with iSPA-PLS is a promising analytical tool for monitoring tea quality

USING UV-VIS SPECTROSCOPY FOR SIMULTANEOUS GEOGRAPHICAL AND VARIETAL CLASSIFICATION OF TEA INFUSIONS.

Autores: Diniz, P.H.G.D.; Gomes, A.A.; Barbosa, M.; T. de Melo Milanez, K. D.; Pistonesi, M.F.; Araújo, M.C.U. *Food Chemistry*. (2016), 192, 374-379. ISSN: 0308-8146

Abstract: In this work we proposed a method to verify the differentiating characteristics of simple tea infusions prepared in boiling water alone (simulating a

home-made tea cup), which represents the final product as ingested by the consumers. For this purpose we used UV-Vis spectroscopy and variable selection through the Successive Projections Algorithm associated with Linear Discriminant Analysis (SPA-LDA) for simultaneous classification of the teas according to their variety and geographic origin. For comparison, KNN, CART, SIMCA, PLS-DA and PCA-LDA were also used. SPA-LDA and PCA-LDA provided significantly better results for tea classification of the five studied classes (Argentinean green tea; Brazilian green tea; Argentinean black tea; Brazilian black tea; and Sri Lankan black tea). The proposed methodology provides a simpler, faster and more affordable classification of simple tea infusions, and can be used as an alternative approach to traditional tea quality evaluation as made by skilful tasters, which is evidently partial and cannot assess geographic origins.

A PENCIL-LEAD BISMUTH FILM ELECTRODE AND CHEMOMETRICS TOOLS FOR SIMULTANEOUS DETERMINATION OF HEAVY METALS IN PROPOLIS SAMPLES. Pierini, Marcelo F. Pistonesi, María S. Di Nezio, María E. Centurión. *Microchemical Journal*. Elsevier Science. (2016), 125, 266–272. ISSN 0026-265x.
Abstract: A simultaneous determination of Zn, Cd, Pb and Cu in raw propolis samples, employing square wave anodic stripping voltammetry and chemometrics tools, was developed. For this purpose, a pencil-lead bismuth film electrode was used as working electrode. In order to optimize the parameters of square wave voltammetry a Box-Behnken design combined with desirability function was used. Different algorithms such Asymmetric Least Squares (AsLS) and Correlation Optimized Warping (COW) were employed in order to preprocessing the raw data. Partial Least Squares (PLS) and Artificial Neuron Networks (ANN) were used to predict the concentration of the four metals in the samples. The method was tested successfully on raw propolis samples obtained from different localities of the Province of Buenos Aires, Argentina and the results were validated with recovery assays.

DETERMINATION OF TRYPTAMINE IN FOODS USING SQUARE WAVE ADSORPTIVE STRIPPING VOLTAMMETRY.
Autores: Daniel J.E. Costa , Ana M. Martínez, Willame F. Ribeiro, Kátia M. Bichinho , María Susana Di Nezio, Marcelo F. Pistonesi y Mario C.U. Araujo. *Talanta*, Volume 154, 134-140 (2016). ISSN:0039-9140.
Abstract: Tryptamine, a biogenic amine, is an indole derivative with an electrophilic substituent at the C3 position of the pyrrole ring of the indole moiety. The electrochemical oxidation of tryptamine was investigated using glassy carbon electrode (GCE), and focusing on trace level determination in food products by square wave adsorptive stripping voltammetry (SWAdSV). The electrochemical responses of tryptamine were evaluated using differing voltammetric techniques over a wide pH range, a quasi-reversible electron-transfer to redox system represented by coupled peaks P1–P3, and an irreversible reaction for peak P2 were demonstrated. The proton and electron counts associated with the oxidation reactions were estimated. The nature of the mass transfer process was predominantly diffusion-limited for the oxidation process of P1, the most selective and sensitive analytical response (acetate buffer solution pH 5.3), being used for the development of SWAdSV method, under optimum conditions. The excellent response allowed the development of an electroanalytical method with a linear response range of from $4.7\text{--}54.5 \times 10^{-8}$ mol L⁻¹, low detection limit (0.8×10^{-9} mol L⁻¹), and quantification limit (2.7×10^{-9} mol L⁻¹), and acceptable levels of repeatability (3.6%), and reproducibility (3.8%). Tryptamine content was determined in bananas, tomatoes, cheese (mozzarella and gorgonzola), and cold meats (chicken sausage and pepperoni sausage), yielding recoveries above 90%, with excellent analytical performance using simple and low cost instrumentatio.

A MAC PROTOCOL TO SUPPORT MONITORING OF UNDERWATER SPACES.

Autores: Rodrigo Santos, Javier Orozco, Sergio F. Ochoa, Roc Meseguer, Gabriel Eggly y Marcelo F. Pistonesi. Sensors. vol. 16, 984 - 1003 (2016). ISSN 1424-8220. Abstract: Underwater sensor networks are becoming an important field of research, because of their everyday increasing application scope. Examples of their application areas are environmental and pollution monitoring (mainly oil spills), oceanographic data collection, support for submarine geolocalization, ocean sampling and early tsunamis alert. The challenge of performing underwater communications is well known, provided that radio signals are useless in this medium, and a wired solution is too expensive. Therefore, the sensors in these networks transmit their information using acoustic signals that propagate well under water. This data transmission type not only brings an opportunity, but also several challenges to the implementation of these networks, e.g., in terms of energy consumption, data transmission and signal interference. In order to help advance the knowledge in the design and implementation of these networks for monitoring underwater spaces, this paper proposes a MAC protocol for acoustic communications between the nodes, based on a self-organized time division multiple access mechanism. The proposal was evaluated using simulations of a real monitoring scenario, and the obtained results are highly encouraging.

DETERMINATION OF CADMIUM RESIDUES IN BEE PRODUCTS USING A 'LAB-MADE' BISMUTH BULK ELECTRODE.

Autores: Gabriela Krepper, Paula B. Resende de Cerqueira, Marcelo F. Pistonesi, María S. Di Nezio & María E. Centurión. International Journal of Environmental Analytical Chemistry , vol. 96, 1331-1340 (2016) ISSN: 0306-7319.

Abstract: Raw propolis and bee pollen has been widely used in different areas such as medicine, food and apitherapy because they have biological and medicinal properties. The beneficial effects of both bee products for human health include antibacterial, antiviral, antimicrobial and anti-inflammatory properties. However, hives exposure to heavy metals, due beekeeping practices and environment, is one of the problems facing beekeepers. The presence of cadmium in bee products should be controlled, because of its high toxicity. A lab-made Bismuth Bulk Electrode (BiBE) was developed for cadmium residue determination in Argentinean bee products such as raw propolis and bee pollen employing square wave anodic stripping voltammetry (SWASV) as electrochemical technique. The SWASV parameters were optimised based on a 2 5 factorial design. The method presents a linear range from 2.00 to 100.0 $\mu\text{g L}^{-1}$ of Cd (II) with a limit of detection (LOD) and a limit of quantitation (LOQ) of 0.78 $\mu\text{g L}^{-1}$ and 2.61 $\mu\text{g L}^{-1}$, respectively. The repeatability was 8.03%, calculated as the relative standard deviation. Recovery experiments were performed using spiked raw propolis and bee pollen samples with standard deviation values from 1.16% to 7.20%. The BiBE is easy and fast to elaborate and the propose method is environmentally friendly and low cost. Then, it can be considered as a good alternative to the quality control of bee products due to its importance in the beekeeping industry.

8.2 TRABAJOS EN PRENSA Y/O ACEPTADOS PARA SU PUBLICACIÓN. *Debe hacer referencia exclusivamente a aquellos trabajos en los que haya hecho explícita mención de su calidad de Investigador de la CIC (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Todo trabajo donde no figure dicha mención no debe ser adjuntado porque no será tomado en consideración. A cada trabajo, asignarle un número e indicar el nombre de los autores en el mismo orden en que figurarán en la publicación y el lugar donde será publicado. A continuación, transcribir el resumen (abstract) tal como aparecerá en la publicación. La versión completa de cada trabajo se presentará en papel, por separado, juntamente con la constancia de aceptación. En cada trabajo, el investigador deberá aclarar el tipo o grado de participación que le cupo en el desarrollo del mismo y, para aquellos en*

los que considere que ha hecho una contribución de importancia, deber á escribir una breve justificación.

8.3 TRABAJOS ENVIADOS Y AUN NO ACEPTADOS PARA SU PUBLICACION. *Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo, indicando el lugar al que han sido enviados. Adjuntar copia de los manuscritos.*

8.4 TRABAJOS TERMINADOS Y AUN NO ENVIADOS PARA SU PUBLICACION. *Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo.*

8.5 COMUNICACIONES. *Incluir únicamente un listado y acompañar copia en papel de cada una. (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores).*

8.6 INFORMES Y MEMORIAS TECNICAS. *Incluir un listado y acompañar copia en papel de cada uno o referencia de la labor y del lugar de consulta cuando corresponda. Indicar en cada caso si se encuentra depositado en el repositorio institucional CIC-Digital.*

9. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.

9.1 DESARROLLOS TECNOLÓGICOS. *Describir la naturaleza de la innovación o mejora alcanzada, si se trata de una innovación a nivel regional, nacional o internacional, con qué financiamiento se ha realizado, su utilización potencial o actual por parte de empresas u otras entidades, incidencia en el mercado y niveles de facturación del respectivo producto o servicio y toda otra información conducente a demostrar la relevancia de la tecnología desarrollada.*

9.2 PATENTES O EQUIVALENTES *Indicar los datos del registro, si han sido vendidos o licenciados los derechos y todo otro dato que permita evaluar su relevancia.*

9.3 PROYECTOS POTENCIALMENTE TRANSFERIBLES, NO CONCLUIDOS Y QUE ESTAN EN DESARROLLO. *Describir objetivos perseguidos, breve reseña de la labor realizada y grado de avance. Detallar instituciones, empresas y/o organismos solicitantes.*

9.4 OTRAS ACTIVIDADES TECNOLÓGICAS CUYOS RESULTADOS NO SEAN PUBLICABLES *(desarrollo de equipamientos, montajes de laboratorios, etc.).*

Curso de capacitación análisis de aguas de corrosión y efluentes empleando técnicas espectroscópicas y potenciometría". dictado al personal técnico de la empresa PETROBRAS, Bahía Blanca, 20, 27 de agosto de 2015 y 3, 10 y 17 de septiembre de 2015. Departamento de Química. INQUISUR UNS. Monto facturación: 26.000 pesos

"Técnicas potenciométricas : UOP 209 Sulfuros y Mercaptanos en soluciones cáusticas . Desarrollo y ajuste". dictado al personal técnico de la empresa PAMPA ENERGÍA, Bahía Blanca, Duración: 30 horas, agosto 2016. Departamento de Química. INQUISUR UNS. Monto facturación: 36.000 pesos.

9.5 Sugiera nombres (e informe las direcciones) de las personas de la actividad privada y/o pública que conocen su trabajo y que pueden opinar sobre la relevancia y el impacto económico y/o social de la/s tecnología/s desarrollada/s.

10. SERVICIOS TECNOLÓGICOS. Indicar qué tipo de servicios ha realizado, el grado de complejidad de los mismos, qué porcentaje aproximado de su tiempo le demandan y los montos de facturación.

11. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN:

11.1 DOCENCIA

11.2 DIVULGACIÓN

En cada caso indicar si se encuentran depositados en el repositorio institucional CIC-Digital.

12. DIRECCION DE BECARIOS Y/O INVESTIGADORES. Indicar nombres de los dirigidos, Instituciones de dependencia, temas de investigación y períodos.

- Codirector de una Beca Interna de Posgrado Tipo II, otorgado por el CONICET por el término de 24 meses al Lic. John Edison Garzon Cardona,. Abril 2014. Resol.Nº 4745 (13/12/2013). INQUISUR- Universidad Nacional del Sur. (Director de la beca: Dr. Rubén José Lara)

- Codirector de una Beca Interna de Posgrado Tipo I, otorgado por el CONICET por el término de 48 meses al Ing. Electrónico Gabriel Martín Eggly,. Junio 2014. IIIE (CONICET). Universidad Nacional del Sur. (Director de la beca: Dr. Rodrigo Santos)

- Codirector de una Beca Interna Doctoral, otorgado por el CONICET por el término de 60 meses de la Química Lorena Cardozo Rivas,. Abril 2015. INQUISUR (CONICET). Universidad Nacional del Sur. (Director de la beca: Dra. Liliana Koll).

- Director de la alumna STUPNIKI Sofía de la carrera de Farmacia UNS. Beca de Estimulo a las Vocaciones Científicas EVC-Consejo Interuniversitario Nacional (CIN). Tema: "Determinación de la actividad catalasa como biomarcador en organismos del Río Colorado empleando la metodología Flow-Batch", 1/10/ 2015-1/04/2017

- Director de la alumna Isabella Cerutti de la carrera de Farmacia, Scuola di Farmacia, Biotechnologie e Scienze Motorie. Università di Bologna (Italia). Convenio de Intercambio Universidad Nacional del Sur- Universidad de Bologna (Italia).Tema: Determinación y caracterización de nanopartículas de plata a través de electroforesis capilar. Lugar de trabajo: Área Química Analítica, Departamento de Química, INQUISUR (UNS-CONICET), Universidad Nacional del Sur. Período: septiembre 2014-febrero 2015.

13. DIRECCION DE TESIS. Indicar nombres de los dirigidos y temas desarrollados y aclarar si las tesis son de maestría o de doctorado y si están en ejecución o han sido defendidas; en este último caso citar fecha.

FINALIZADA:

- Director del alumno Elizeu Cordeiro Caiana, para optar al grado de Mestre en Química. Tema: "DETERMINAÇÃO SIMULTÂNEA DE LIPÍDIOS NEUTROS E POLARES EM ZOOPLÂNCTON POR ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCÊNCIA SINCRÔNICA E CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA". Lugar: Programa de Pós-Graduação em Química/ Departamento de Química/Universidade Federal da Paraíba. Becário CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior). . Director: Wallace Duarte Fragoso. Fecha de defensa y aprobada el 5 de mayo de 2015. Lugar Universidade Federal da Paraíba.

EN EJECUCIÓN:

•CoDirector de la tesis de la Bqca. Gabriela Krepper, Becaria del CONICET, para optar al grado de Doctor en Química. Tema "DESARROLLO DE NUEVOS MÉTODOS ANALÍTICOS PARA LA DETERMINACIÓN DE CONTAMINANTES EN PRODUCTOS APÍCOLAS. EMPLEO DE SISTEMAS ELECTROQUÍMICOS". Expediente 3388/2013. Fecha de iniciación 15 de octubre de 2013. Lugar de trabajo: Área Química Analítica, Departamento de Química, INQUISUR (UNS-CONICET), Universidad Nacional del Sur.

•Director de la tesis del Bqca. Soledad García Paoloni, para optar al grado de Doctor en Ciencia y Tecnología de los Alimentos. Tema "DETERMINACIÓN DE AGROQUÍMICOS Y METALES EN POLEN CORBICULAR RECOLECTADO POR APIS MELLIFERA L. EN LA ZONA DEL VALLE INFERIOR DEL RÍO COLORADO". Expediente 2935/2014. Fecha de iniciación de agosto de 2014. Lugar de trabajo: Área Química Analítica, Departamento de Química, INQUISUR (UNS-CONICET), Universidad Nacional del Sur.

•Director de la tesis del Qca. Cardozo Rivas Lorena, becaria del CONICET, para optar al grado de Doctor en Química. Tema "SÍNTESIS DE NUEVOS COMPUESTOS ORGANOESTÁNNICOS CON LIGANDOS FUNCIONALIZADOS. DESARROLLO DE MÉTODOS ANALÍTICOS PARA SU DETECCIÓN Y/O ESPECIACIÓN". Expediente 2680/14. Fecha de iniciación agosto de 2014. Lugar de trabajo: Área Química Orgánica, Departamento de Química, INQUISUR (UNS-CONICET), Universidad Nacional del Sur.

•CoDirector de la tesis del Ing. Electrónico Gabriel Martín Eggly, para optar al grado de Doctor en Ingeniería. Tema "ESTUDIO, DESARROLLO E IMPLEMENTACIÓN DE SISTEMAS EMBEBIDOS FLOW- BATCH PARA EL ANÁLISIS DE MUESTRAS PETROQUÍMICAS, MEDIOAMBIENTALES Y ALIMENTOS". Expediente 3505/2014. Fecha de iniciación 7 de octubre de 2014. Lugar de trabajo: Dpto. Ing. Eléctrica y Computadoras. IIIE. (UNS-CONICET), Universidad Nacional del Sur.

14. PARTICIPACION EN REUNIONES CIENTIFICAS. *Indicar la denominación, lugar y fecha de realización, tipo de participación que le cupo, títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas y autores de los mismos.*

•VIII Congreso Argentino de Química Analítica. " Determinación de materia grasa en hamburguesas de pollo empleando espectroscopia NIR (infrarrojo cercano), imágenes digitales y herramientas quimiométricas" Autores: Romeo F.; Fernandes, D.D.S.; Diniz, P.H. ; Araújo, M.C.U.; Pistonesi, M.F.; Centurión, M.E.. La Plata. 3- 6 de octubre 2015.

•VIII Congreso Argentino de Química Analítica. "Desarrollo de un método electroforético para la separación y caracterización de nanopartículas de plata" Autores: González FÁ, A.J.; Cerutti I.; Springer, V; Girotti S., Centurión, M.E.; Di Nezio, M.S.; Pistonesi M.F.. La Plata. 3- 6 de octubre 2015.

•VIII Congreso Argentino de Química Analítica. "Sistema Flow-Batch para la determinación simultánea de fenoles, flavonoides y actividad antioxidante en extractos de propóleos comerciales empleando sonoquímica" Autores: Krepper, G.; Fueyo F.; Fuentes F.; Santos R.; Centurión, M.E.; Di Nezio, M.S.; Pistonesi M. La Plata. 3- 6 de octubre 2015.

•VIII Congreso Argentino de Química Analítica. "Efecto del tipo de agua en la liberación de fluoruro, aluminio y otros elementos en infusiones de té comercializados en Argentina" Autores: Grau Talevi,T1; Sartore, G.E; Álvarez, M. B; Centurión, M.E; Diniz, P.H.G.D.; Pistonesi, M.F.. La Plata. 3- 6 de octubre 2015.

•VIII Congreso Argentino de Química Analítica. "Determinación de humedad y proteínas totales en polen corbicular empleando espectroscopia en infrarrojo cercano"

Autores: García Paoloni, M. S. ;Véras Neto, G. ; Pistonesi, M. F.. La Plata. 3- 6 de octubre 2015.

•VIII Congreso Argentino de Química Analítica. "Desarrollo de un detector ultrasónico de bajo costo para la determinación de cloruro de potasio y cloruro de sodio en productos farmacéuticos" Autores: Eggly, G.M.; Blackhall, M.; Diniz, P.H.; Araújo Gomes, A. Santos R.M.; Ugulino de Araújo, M.C.; Pistonesi, M.F.. La Plata. 3- 6 de octubre 2015.

•VIII Congreso Argentino de Química Analítica. "Sistema automático Flow-Batch para la determinación de tetraciclinas en productos apícolas empleando electrodos de film de antimonio" Autores: Krepper, G.; Pierini,G.; Pistonesi, M.; Di Nezio,M.S.. La Plata. 3- 6 de octubre 2015.

•VIII Congreso Argentino de Química Analítica. "Caracterización de la materia orgánica disuelta en dos sitios del estuario de Bahía Blanca" Autores: Martínez A.M.; Garzón C.J.E.; Benito V.D.; Moyano J.; Pistonesi M.F.; Dutto S.;Lopez Abatte C.; Guinder V.; Uibrig R.; Nahuelhual E.; Lopez Cazorla A.C.; Hoffmeyer M.S.. La Plata. 3- 6 de octubre 2015.

•XXXI Congreso Argentino de Química " Determinación de polifenoles totales en polen de abejas empleando espectroscopía en infrarrojo cercano". Autores: M. Soledad García Paoloni, Federico D. Vallese¹, Valeria Springer, Marcelo Pistonesi, Germano Véras, Rossana O. da Nóbrega, Sheila C. de Oliveira. Buenos Aires. 25 - 28 de octubre 2016.

15. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC. *Señalar características del curso o motivo del viaje, período, instituciones visitadas, etc.*

Estancia externa. Programa de cooperación bilateral. CONICET-CNPq. Tema del proyecto: "Desarrollo de nuevos métodos analíticos para la determinación de insecticidas, antibióticos y metales en productos apícolas de Argentina y Brasil".

Las tareas científicas se llevaran a cabo en el centro que dirige el Profesor Dr. Mário César Ugulino de Araújo (Coordinador brasileño del proyecto), Química Analítica, Departamento de Química, Universidad Federal de Paraíba, Brasil. CONICET-CNPq (Argentina-Brasil), (Convenio y Normativa 863/14 de cooperación internacional, Período: 2015-2016). (desde 18 noviembre hasta 17 de diciembre de 2015).

16. SUBSIDIOS RECIBIDOS EN EL PERIODO. *Indicar institución otorgante, fines de los mismos y montos recibidos.*

MIEMBRO INVESTIGADOR :

"Nuevos métodos analíticos para la determinación de parámetros de calidad comercial y diferenciada en alimentos funcionales de origen animal (carnes y pescados) comercializados en Argentina y Brasil". Proyecto Conjunto de Cooperación en el marco de programas de cooperación bilateral MINCYT-CAPEs (BR/red13/04) "Nuevos métodos analíticos para la determinación de parámetros de calidad comercial y de alimentos diferenciados origen animal funcional (carne y pescado) y comercializados en Brasil Argentina". Directores: Química Orgánica (UNS), Argentina: Dr. Julio César Podestá; Química Analítica (UNS), Argentina: Dra. María Eugenia Centurión; Electroquímica (UNRC), Argentina: Dr. Héctor Fernández, Química Analítica (UEPB), Brasil: Dr. José Germano Véras Neto y Química Analítica (UFPB), Brasil: Dr. Mario Ugulino de Araujo. Período: 2014-2017.

"Desarrollo de nuevos métodos analíticos para la determinación de insecticidas, antibióticos y metales en productos apícolas de Argentina y Brasil". Subsidio para actividades de cooperación internacional. Programa de cooperación bilateral- Nivel II.

CONICET-CNPq. Convocatoria 2013. Titular del proyecto en Argentina: Dr. Julio C. Podestá, INQUISUR (UNS-CONICET), Universidad Nacional del Sur. Titular de la contraparte: Dr. Mario Ugulino de Araujo, Universidade Federal de Paraiba, Brasil. Período: 2014-2017.

"Estrategias químicas para la preservación y optimización de la calidad ambiental de Bahía Blanca y su región". Proyecto Unidades Ejecutoras (PUE), CONICET. Código: 22920160100050CO. Director: Gustavo Appignanesi, 2016-2021.

"Evaluación de la calidad de agua para consumo rural y otras fuentes alternativas de abastecimiento urbano". Proyectos de Investigación Orientados CONICET-UNS (PIO). Código: 20720150100031CO.- Director: Teresa Parodi, 2016-2018.

DIRECTOR:

Proyecto del Grupo de Investigación Consolidado UNS, PGI 24/Q060. "Desarrollo de métodos Flow-Batch para la detección y/o cuantificación de compuestos persistentes en ambientes acuáticos mediante el empleo de biomarcadores". Director: Marcelo F. Pistonesi. Período: 2014-2015.

"Implementación de nuevas técnicas analíticas para el control de calidad de productos apícolas en la región de Bahía Blanca y su zona de influencia". Proyecto del Grupo de Investigación-Temas de interés regional (PGI-TIR) UNS. Director: María Eugenia Centurión, Codirector: Dr. Marcelo F. Pistonesi. Período: 2014-2015.

"Desarrollo de nuevos métodos analíticos para la valoración de la calidad nutricional de productos apícolas y cárnicos en la región de Bahía Blanca y su zona de influencia". Programa de Subsidios para Proyectos de Investigación Científica y tecnológica. Comisión de Investigaciones Científicas. CIC 2014. Director : Dr. Marcelo Fabián Pistonesi (INQUISUR.UNS). Período: 2014-2016.

Proyecto del Grupo de Investigación Consolidado UNS, PGI 24/Q079. "Sistemas Flow-Batch empleando biomarcadores, para la detección y/o cuantificación de compuestos persistentes en ambientes acuáticos de la zona del valle inferior del río Colorado". Director: Marcelo F. Pistonesi. Período: 2016-2019.

17. OTRAS FUENTES DE FINANCIAMIENTO. *Describir la naturaleza de los contratos con empresas y/o organismos públicos.*

18. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO.

19. ACTUACION EN ORGANISMOS DE PLANEAMIENTO, PROMOCION O EJECUCION CIENTIFICA Y TECNOLÓGICA. *Indicar las principales gestiones realizadas durante el período y porcentaje aproximado de su tiempo que ha utilizado.*

20. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO. *Indicar el porcentaje aproximado de su tiempo que le han demandado.*

Profesor Adjunto con dedicación exclusiva por antecedentes y oposición.

Asignaturas: Prácticas de Química Analítica, Química Analítica Avanzada y Química Analítica General.

Materias y cursos dictados en el año 2015

Código: 6293
Asignatura: Química Ambiental B (pregrado)
Primer cutrimestre
Carrera: Bioquímica
Horas semanales (dictado de clases): 4 horas
Duración (en semanas): 12

Código: 6284
Química Ambiental (pregrado)
Primer cuatrimestre
Carrera: Lic. en Química
Horas semanales (dictado de clases): 4 horas
Duración (en semanas): 12

Código: 6313
Asignatura: Química de la Ecósfera (pregrado)
Primer cuatrimestre cutrimestre
Carrera: Profesorado en Química
Horas semanales (dictado de clases): 4 horas
Duración (en semanas): 12

Materias y cursos dictados en el año 2016

Código: 6293
Asignatura: Química Ambiental B (pregrado)
Primer cutrimestre
Carrera: Bioquímica
Horas semanales (dictado de clases): 4 horas
Duración (en semanas): 12

Código: 6284
Química Ambiental (pregrado)
Primer cuatrimestre
Carrera: Lic. en Química
Horas semanales (dictado de clases): 4 horas
Duración (en semanas): 12

Código: 6313
Asignatura: Química de la Ecósfera (pregrado)
Primer cuatrimestre cutrimestre
Carrera: Profesorado en Química
Horas semanales (dictado de clases): 4 horas
Duración (en semanas): 12

Código: 6280
Química Aplicada (pregrado)
Segundo cuatrimestre
Carrera: Lic. en Química
Horas semanales (dictado de clases): 4 horas
Duración (en semanas): 16

Cursos Curriculares: Postgrado (reconocido por la Secretaría de Postgrado y Educación Continua de la Universidad Nacional del Sur)

•“Tópicos de Química Analítica”. A cargo del dictado del 33 % de clases teóricas.

Duración: 2 do. Cuatrimestre 2016.

Dictado de las Prácticas Profesionalizantes (modulo de Electroquímica. Duración: 20 horas) llevadas a cabo en la UNS entre los meses de junio y noviembre año 2016, en el marco del Acta acuerdo Establecimientos Educativos Institucionales Oferentes firmada entre la Escuela de Educación Secundaria Técnica N 1 de Punta Alta y el Departamento de Química de la UNS.

21. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TITULOS ANTERIORES. *Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período.*

JURADO DE TESIS DOCTORAL

Miembro Titular del Jurado de evaluación de la tesis doctoral titulada "CULTIVO Y ANÁLISIS LIPÍDICOS DE LA DIATOMEA NAVICULA CINCTA, AISLADA DEL ESTUARIO DE BAHÍA BLANCA (Pcia. de Buenos Aires, Argentina): EVALUACIÓN DEL POTENCIAL USO BIOTECNOLÓGICO", elaborada por la Lic. Guadalupe Barnech Bielsa bajo la dirección de la Dra. Patricia Leonardi y la Dirección Adjunta de la Dra. Cecilia Popovich. Departamento de Biología, Bioquímica y Farmacia Universidad Nacional del Sur. Julio de 2015.

DIRECCIÓN DE TESINA DE LA CARRERA DE LIC. EN QUÍMICA Y PROYECTO FINAL DE LA CARRERA DE ING. ELECTRÓNICO.

FINALIZADAS:

Alumna Verónica Daniela Benito

Título de la tesina: "Caracterización de materia orgánica disuelta en tres regiones del mar argentino empleando espectroscopia de Fluorescencia Molecular".

Institución, lugar: UNS. INQUISUR .Depto. Química, Área III, Química Analítica, 2015.

Tipo de dirección: Director.

Alumno: Martín Nabaes Bonnefón

Título del Proyecto final de carrera Ing. Electrónico: " Desarrollo de un potenciostato portátil para control de calidad en productos apícolas".

Institución, lugar: UNS. INQUISUR .Departamento de Química. Área III, Química Analítica. Departamento. de Ing. Eléctrica y Computadoras. 2015

Tipo de dirección: Codirector

Director: Ing. Rodrigo Santos. Departamento. de Ing. Eléctrica y Computadoras

Alumno: Matías Blackhall

Título del Proyecto final de carrera Ing. Electrónico: " Sistema automático Flow-Batch para la determinación de glicerol libre en biodiesel utilizando piezoeléctricos".

Institución, lugar: UNS. INQUISUR .Departamento de Química. Área III, Química Analítica. Departamento. de Ing. Eléctrica y Computadoras. 2016.

Tipo de dirección: Codirector

Director: Ing. Rodrigo Santos. Departamento. De Ing. Eléctrica y Computadoras.

EN EJECUCIÓN :

Alumno: Esteban Binsak

Título del Proyecto final de carrera Ing. Electrónico: " Sistema automático Flow-Batch empleando imágenes digitales".

Institución, lugar: UNS. INQUISUR .Departamento de Química. Área III, Química Analítica. Departamento. de Ing. Eléctrica y Computadoras. Abril 2016 y continua.

Tipo de dirección: Codirector
Director: Ing. Rodrigo Santos. Departamento. De Ing. Eléctrica y Computadoras.

Supervisor de las tareas que se realizan en el Laboratorio de Computación de Química (LACOQUI) del Departamento de Química. UNS. 2009 - 2017.

Coordinador Suplente del Laboratorio Común de Usos Compartido (LIUC) del Departamento de Química. A partir 2015 - 2016. UNS.

Presidente del Consejo Coordinador del Programa de Posgrado en Ciencia y Tecnología de los Alimentos, 2015 - 2019. UNS.

MIEMBRO DE CONVENIOS

Acuerdo específico entre la Cooperativa de Trabajo Apícola Pampero Ltda. CAP de la ciudad de Bahía Blanca y el Grupo de Investigación del Área de Química Analítica, integrado por los Dres. María E. Centurión, María S. Di Nezio y Marcelo F. Pistonesi, del Departamento de Química, bajo el marco del Convenio de Cooperación celebrado entre dicha Cooperativa y la Universidad Nacional del Sur, el día 30 de mayo de 2013 (Expediente N° 1289/13).

Acuerdo marco entre la Universidad Nacional del Sur, la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CIC), el Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria de la Nación (INTA Hilario Ascasubi), y la Corporación de Fomento del Valle Bonaerense del Río Colorado (CORFO). El presente Acuerdo Marco de Colaboración y Asistencia destinado a promover el desarrollo de la investigación y realización de estudios tendientes a mejorar la eficiencia del aprovechamiento del agua de riego y preservación del recurso hídrico del Valle Bonaerense del Río Colorado. Fecha del acuerdo: 1 de octubre de 2015.

ORGANIZACIÓN DE EVENTOS CIENTÍFICOS

Miembro organizador de las Primeras Jornadas de Especialidad en alimentos, Bahía Blanca septiembre 2015. UNS.

22. TITULO, PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PROXIMO PERIODO. *Desarrollar en no más de 3 páginas. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

PLAN DE TRABAJO FUTURO

OBJETIVO GENERAL

El objetivo principal radica en desarrollar e implementar nuevos métodos analíticos que permitan detectar y/o cuantificar diferentes sustancias para el análisis en muestras medioambientales, biocombustibles y alimentos de la región de Bahía Blanca y su zona de influencia.

Se pretende desarrollar métodos automatizados de análisis, utilizando sistemas miniaturizados automáticos empleando la metodología Flow-Batch.

Se hará uso de herramientas quimiométricas para los estudios de clasificación y calibración multivariada.

OBJETIVOS ESPECIFICOS

Biocombustibles

Desarrollar e implementar métodos analíticos para la evaluación y control los parámetros de calidad de los biocombustibles obtenidos a partir de microalgas (diatomeas) .

Alimentos

Desarrollar e implementar métodos analíticos para el análisis de muestras de productos agropecuarios comerciales (miel, polen, carnes y té verde y negro nacionales e internacionales) . A partir de la información obtenida se analizará cuales son los parámetros más significativos para la caracterización de las muestras comerciales, como también detectar adulteraciones y falsificaciones.

Medio ambientales

Desarrollar sistemas de valoración preliminar basado en los indicadores (químicos y bioquímicos) e índices globales, que permita conocer el estado de producción primaria del Río Colorado.

En todos casos se implementarán técnicas UV-vis, luminiscentes y NIR-Mid-IR en sistemas Flow-Batch para la detección y determinación de los analitos.

Las líneas de trabajo que se desarrollan en el grupo de Investigación al que pertenezco están orientadas al estudio de sistemas analíticos y al desarrollo de nuevos métodos analíticos aplicados a biocombustibles, alimentos y muestras medio ambientales. Se utilizan las metodologías de Flow-Batch y microFlow-Batch para automatizar los sistemas de análisis, tanto en el pretratamiento de las muestras como en la etapa de determinación del o los analitos empleando técnicas ópticas. Además, se emplean de ser necesario, herramientas quimiométricas (PLS, APS, MCR-ALS) con la finalidad de determinar simultáneamente varios componentes en una mezcla, reduciendo el tiempo de análisis, mejorando la precisión en la predicción y permitiendo cuantificar en presencia de interferentes.

ACTIVIDADES Y METODOLOGIAS

Para evaluar los parámetros de calidad de las muestras en las diferentes matrices se emplearán técnicas de detección adecuada (fluorescencia, absorción molecular, quimioluminiscencia, NIR y Mid-IR), realizando estudios en función del pH, temperatura, fotodegradación, reacciones con oxidante enérgicos, reacciones enzimáticas, etc. Se prevé emplear técnicas de separación y preconcentración.

Para automatizar parcial y/o totalmente el método desarrollado, se empleará la metodología Flow-Batch. Se emplearan diseños experimentales adecuados para optimizar las distintas variables. Se realizarán estudios de las variables químicas y Flow-Batch (velocidades de flujo, selección de la cámara más adecuada para el mezclado y/o detección, tiempo de accionamiento de válvulas, etc.) involucrados en el sistema desarrollado.

El método propuesto será validado adecuadamente y será aplicado a muestras comerciales.

La metodología Flow Batch se basa en la combinación de las características intrínsecas de los sistemas en flujo con la robustez de los sistemas en batch o discretos. La etapa de carga de la muestra y/o reactivos y el transporte de los mismos se realiza en forma similar a los sistemas de flujo continuo. La mezcla, reacción y medida de la señal se efectúan en una cámara en forma discontinua. Funcionan apenas sobre un riguroso control vía microprocesador garantizando el tiempo del accionamiento de válvulas solenoides y en consecuencia los volúmenes de las soluciones adicionados a la cámara.

El diseño y la implementación de estos sistemas de flujo continuo se basan en el tipo de análisis a llevar a cabo. Esto significa que para cada analito o familia de compuestos hay que seleccionar reactivos, condiciones experimentales y detector apropiado.

Se deberán probar diferentes configuraciones hasta lograr la adecuada, lo que se comprueba a través de la obtención de la máxima señal.

Luego se debe optimizar ese diseño, lo que se puede llevar a cabo por el método univariante o multivariante con aporte quimiométrico. En determinaciones de multicomponentes se haría uso de herramientas quimiométricas, como calibración multivariada (N-PLS), PARAFAC, APS etc.

Se realizarán los diseños experimentales y el ajuste de modelos matemáticos empleando técnicas estadísticas actuales.

Por otra parte, hay que tener en cuenta la matriz donde se encuentra el analito, la cual puede estar en distintos estados y habrá que decidir si hay que aislar al analito, separar interferentes, disolver, disgregar, etc. lo que conlleva a usar las técnicas adecuadas.

Todas estas técnicas de pretratamiento se optimizan adecuadamente, variando el caudal, tiempos, concentraciones, solventes, etc.

El tratamiento automatizado de la muestra y sistema Flow Batch desarrollado para la determinación del o de los analitos serán acoplados con el objeto de automatizar la mayor parte del proceso analítico.

La validación de los métodos desarrollados se hará aplicando técnicas quimiométricas y cualimétricas adecuadas para cada caso (materiales de referencia, comparación con métodos estándar, etc.).

El esquema general del Plan de trabajo, que corresponde a cada grupo de analitos en cada matriz seleccionada, será el siguiente:

a. Se seleccionará una especie o grupo de analitos, en base a la bibliografía, teniendo en cuenta que la revisión bibliográfica se actualiza en forma permanente.

b. Se estudiará el medio apropiado en función de la técnica de detección seleccionada de manera tal que la señal represente la presencia del analito en estudio y en caso de ser necesario una derivatización del/los analito/s con una o más reacciones químicas, se buscará el/los reactivo/s adecuado/s.

Algunas especies pueden ser fotodegradadas, para lo que se utilizan sistemas continuos con foto-reactores. Estos reactores son lámparas de distinta intensidad de radiación y longitudes de onda que proveen fotones que actúan como "reactivo químico". En estos casos es necesario estudiar potencia de la lámpara, longitud del reactor, caudal, tiempo de foto-reacción, etc.

c. Se analizará el uso de reactivos (surfactantes, ciclodextrinas, otros) que puedan provocar un aumento de absorbancia y/o corrimiento batocrómico en el espectro.

d. De utilizarse algún proceso de extracción, ya sea para separar interferencias como para preconcentrar al/los analitos, se estudiarán el tipo de soporte para rellenar las mini-columnas, cantidad de material de relleno, caudales de carga y elución, tiempos de retención, factor de enriquecimiento, etc. Dado que el sistema se implementará en línea, es importante estudiar la posición de la mini-columna en el montaje Flow Batch (reemplazando el bucle de muestra, en el canal de carga, en canal principal, en lugar de la celda de flujo, etc.)

e. Las muestras que se analizarán pueden provenir de diversas matrices, por lo tanto se debe tener en cuenta:

Matrices sólidas: Para cada muestra en particular, se buscará el adecuado tratamiento: disgregación, disolución, extracción, etc., empleando Horno microondas (convencional o focalizado), ultrasonido entre otros. Esto implica buscar el solvente apropiado, las condiciones del aparato utilizado para el tratamiento y las variables del sistema en continuo que permitan acoplar directamente este tratamiento con el montaje del sistema Flow Batch diseñado para la detección y/o determinación correspondiente.

Matrices líquidas: hay que considerar si el analito tiene que ser separado, preconcentrado, diluido, etc., en cada caso hay que desarrollar el sistema

correspondiente. En la mayoría de los casos se utiliza mini-columnas rellenas con el material que se adapte ya sea para separar o para preconcentrar o para retener los interferentes, etc.

Matrices gaseosas: estas muestras se absorben en un solvente, es la técnica mas usual.

En todos los casos la muestra pretratada es ingresada en línea al sistema Flow Batch para su posterior análisis. Este acoplamiento debe optimizarse en función de los parámetros del sistema seleccionado.

g. La elección del detector es un punto clave de la determinación analítica. Las señales obtenidas son procesadas mediante técnicas quimiométricas.

h. Una vez que el nuevo método ha sido totalmente optimizado, incluyendo el tratamiento de la muestra en continuo, se debe validar. Para ello se deben determinar todas las propiedades analíticas, buscar el más alto nivel metrológico posible y si no se dispone de los materiales certificados, se validará por otro camino para asegurar la mayor calidad analítica. También sería muy importante calcular la incertidumbre expandida, para lo cual habría que calcular la incertidumbre en cada uno de los pasos que comprende el método analítico.

FACTIBILIDAD

Lugar de trabajo

El plan trabajo se llevará a cabo en el Área III, Química Analítica. Departamento de Química, INQUISUR-CONICET, Universidad Nacional del Sur.

Además se cuenta con los equipos del Laboratorio de Instrumentación de uso compartido (LIUC), perteneciente al Departamento de Química, INQUISUR-CONICET de esta Universidad:

1 espectrofotómetro UV-Visible (GBC CINTRA 20 con "Network/Workstation"); 1 cromatógrafo de Gases (KONIK HRGC 3000C con "Workstation", detectores: FID y TCD); 1 cromatógrafo de Gases acoplado a un espectrómetro de masa (HEWLETT PACKARD HP6890 con HP ChemStation); 1 cromatógrafo de Gases (SHIMADZU GC-14B con "chromatography workstation" detectores FID y TCD); 1 cromatógrafo de Gases (SHIMADZU GC-9A con registrador C-R6A, Chromatopac, Shimadzu detector: ECD); 1 equipo de electroforesis capilar Beckman, Modelo MDQ, con detector UV-V de arreglo de diodos; 1 Espectrofluorímetro SHIMADZU RF5301; 1 potenciostato BAS EPSILON equipado con un electrodo de disco rotatorio RDE2; 1 Calorímetro diferencial DSC Q20. TA Instruments; 1 Lofilizador L-A-B4. Rifacor. Horno microondas Monowave 300 AntonMedidor de grosor de películas FILMETRICS, Modelo F20-UV. Espectrofotómetro FTIR-NIR Thermo Scientific Nicolet iS50. Espectrómetro Perkin Elmer AAnalyst 200. Equipo de medición de densidad y velocidad de sonido. Anton Paar DSA 5000M. Sistema de electroanálisis. RDE-2. Bioanalytical Systems, Inc. Sistema cromatográfico HPLC-PDA. Waters 600.

Condiciones de la presentación:

- A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Investigador, la que deberá incluir:
- Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 22).
 - Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, en otra carpeta o caja, en cuyo rótulo se consignará el apellido y nombres del investigador y la leyenda "Informe Científico Período"
 - Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.
- B. Envío por correo electrónico:

- a. Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: ininvest@cic.gba.gob.ar (puntos 1 al 22), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.
- b. En el mismo correo electrónico referido en el punto a), se deberá incluir como un segundo documento un currículum resumido (no más de dos páginas A4), consignando apellido y nombres, disciplina de investigación, trabajos publicados en el período informado (con las direcciones de Internet de las respectivas revistas) y un resumen del proyecto de investigación en no más de 250 palabras, incluyendo palabras clave.

C. Sistema SIBIPA:

- a. Se deberá peticionar el informe en la modalidad on line, desde el sitio web de la CIC, sistema SIBIPA (ver instructivo).

Nota: El Investigador que desee ser considerado a los fines de una promoción, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.