

# CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO

## Informe Científico<sup>1</sup>

PERIODO <sup>2</sup>: 2017

### 1. DATOS PERSONALES

*APELLIDO: LAURELLA*

*NOMBRES: SERGIO LUIS*

*Dirección Particular: Calle:*

*Localidad: La Plata CP: 1900 Tel:*

*Dirección electrónica (donde desea recibir información, que no sea "Hotmail"):*

### 2. TEMA DE INVESTIGACION

ESTUDIO DE LA CAPACIDAD DE ADSORCIÓN DE PLAGUICIDAS DE LA FAMILIA DE LOS  
CARBAMATOS SOBRE PARTICULAS DE SILICE Y SILICE FUNCIONALIZADA

**PALABRAS CLAVE (HASTA 3)** adsorción plaguicidas sílice

### 3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

*INGRESO: Categoría: Inv.Asoc.Adj. c/ director Fecha: 1/11/16*

*ACTUAL: Categoría: Inv.Asoc.Adj. c/ director desde fecha: 1/11/16*

### 4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA

*Universidad y/o Centro: Universidad Nacional de La Plata*

*Facultad: Ciencias Exactas*

*Departamento: Química*

*Cátedra: Química Orgánica Básica*

*Otros: CEDECOR (Centro de Estudio de Compuestos Orgánicos)*

*Dirección: Calle: 47 y 115 Nº: s/n*

*Localidad: La Plata CP: 1900 Tel: 424-3104*

*Cargo que ocupa: Jefe de Trabajos Prácticos Dedicación Exclus.*

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

*Apellido y Nombres: Patricia Allegretti*

*Dirección Particular: Calle:*

*Localidad: Ensenada CP:*

*Dirección electrónica:*

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

<sup>2</sup> 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.*

Durante mi tesis doctoral y también en los años posteriores, me dediqué a la elucidación de estructuras moleculares y al estudio de equilibrios e interacciones utilizando técnicas espectroscópicas (RMN, MS, IR). Desde el año 2012 me he abocado al estudio de la adsorción de pesticidas sobre diferentes superficies, teniendo como objetivo tanto el diseño de sistemas de adsorción efectivos, así como también el estudio de las interacciones y mecanismos de adsorción presentes en los diferentes sistemas pesticida-adsorbato estudiados. La funcionalización de la sílice y el estudio de la interacción entre pesticidas y diferentes grupos funcionales superficiales es una arista muy interesante que estamos comenzando a estudiar actualmente.

## 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, explícite la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

Durante el presente período me he abocado a la co-dirección de dos tesis doctorales en temáticas que incluyen directamente las temáticas del presente informe.

Por un lado, la Tesis Doctoral que lleva adelante el Lic. Diego Colasurdo (de la cual soy co-director) se encuentra en plena etapa de desarrollo experimental, por un lado evaluando los niveles de adsorción del pesticida metolaclor sobre carbón activado (en diferentes condiciones de temperatura, fuerza iónica y pH), y por otro desarrollando nuevos materiales derivados de la sílice para comprobar su efectividad en el proceso de adsorción de este pesticida (actualmente se ha derivatizado sílice comercial con grupos orgánicos tales como amino, amido y carboxilo).

Por otro lado, me encuentro co-dirigiendo la tesis de la Lic. Maricel Caputo, colaborando en la identificación de componentes orgánicos (especialmente fenólicos) presentes en vinaza y su adsorción por medio de carbón activado en vistas de una potencial remediación.

Cabe aclarar que durante este período he concretado la escritura de dos libros, un capítulo de libro y dos trabajos en revistas (en colaboración con otros grupos) en lo referente a la determinación de estructuras de compuestos por RMN, tema en el cual me he especializado durante mi Tesis Doctoral y que pretendo volcar en el próximo período a la determinación estructural en plaguicidas.

## 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.*

1) Artículos en revistas

M. Nigro, J. Brardinelli, E. Lewkowicz; A. Iribarren; S. Laurella; "Aldehyde-hydrate equilibrium in nucleobase 2-oxoethyl derivatives: an NMR, ESI-MS and theoretical study". Journal of Molecular Structure, 1144, 49-57 (2017). Con referato.

A. Spaltro, M. Caputo, M.N. Pila, D.D. Colasurdo, S.L. Laurella, D.L. Ruiz, M.M. Schiavoni, P.E. Allegretti; "Removal of Plaguicides MCPA and Imazapic from Aqueous Solution Using Carbonaceous Materials". International Journal of Engineering and Research and Management, 3(12), 20-28 (2016). Con referato.

## 2) Libros

S.L. Laurella; "RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR, Una herramienta para la elucidación estructural", La Plata, EDULP, 2017, ISBN 978-950-34-1522-1.

S.L. Laurella, P.E. Allegretti; "ESTUDIO DEL TAUTOMERISMO EN  $\beta$ -CETOAMIDAS POR RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR", Madrid, Editorial Académica Española, 2017, ISBN-13: 978-3639533897.

## 3) Capítulos de libro

S.L. Laurella, D.D. Colasurdo, D.L. Ruiz, P.E. Allegretti; NMR as a Tool for Studying Rapid Equilibria: Tautomerism" in "Applications of NMR Spectroscopy; Vol. 6", Ed. Bentham eBooks, 2017 (en prensa) ISBN: 978-1-68108-440-4

**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, deberá 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.).*

---

**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.*

---

**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.*

Periodo: Abril 2015 hasta la fecha.

Cargo adquirido: Co-director

Apellido y Nombres de supervisado: Caputo, Maricel

Tema de trabajo: Estudio de remediación de vinaza por pirolisis y adsorción.

Lugar: Grupo de investigación Determinación de Estructuras, LADECOR, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

Periodo: Junio 2015 hasta la fecha.

Cargo adquirido: Co-director

Apellido y Nombres de supervisado: Colasurdo, Diego

Tema de trabajo: Estudio de Adsorción de Imazapir sobre sílica funcionalizada.

Lugar: Grupo de investigación Determinación de Estructuras, LADECOR, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

**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.*

XXI SINAQO, Simposio Nacional de Química Orgánica, Potrero de Funes (San Luis), 8 al 11 de noviembre de 2017.

Presentación de Póster: "Estudio del equilibrio tautomérico de uracilos seleccionados mediante espectrometría de masas" Colasurdo, Diego D.; Pila, Matías N.; Ruiz, Danila L.; Laurella, Sergio L.; Allegretti Patricia E.

XXI SINAQO, Simposio Nacional de Química Orgánica, Potrero de Funes (San Luis), 8 al 11 de noviembre de 2017.

Presentación de Póster: "Estudio comparativo de la adsorción de 2,4-D y metolaclor sobre carbón activado" Pila, Matías N.; Colasurdo, Diego D.; Ruiz, Danila L.; Laurella, Sergio L.; Allegretti Patricia E.

XXI SINAQO, Simposio Nacional de Química Orgánica, Potrero de Funes (San Luis), 8 al 11 de noviembre de 2017.

Presentación de Póster: "Evaluación de la disminución de la carga contaminante de la vinaza por adsorción sobre carbones activados" Caputo, Maricel; Spaltro, Agustín; Furlong, Jorge J.P.; Laurella, Sergio L.; Schiavoni, María de las Mercedes.

XXI SINAQO, Simposio Nacional de Química Orgánica, Potrero de Funes (San Luis), 8 al 11 de noviembre de 2017.

Presentación de Póster: "Adsorción discontinua y en lecho fijo sobre carbón activado del herbicida MCPA" Spaltro, Agustín; Caputo, Maricel; Laurella, Sergio L.; Ruiz, Danila L.; Allegretti, Patricia E.

XXI SINAQO, Simposio Nacional de Química Orgánica, Potrero de Funes (San Luis), 8 al 11 de noviembre de 2017.

Presentación de Póster: "Equilibrio ceto-enólico en análogos de nucleósidos acíclicos" Nigro, Mariano J.; Fernandez Varela, Romina; Iribarren, A.; Laurella, Sergio L.; Lewkowicz, Elizabeth S.

4º Congreso Internacional Científico y Tecnológico de Buenos Aires, Quilmes, Buenos Aires, Argentina, 1º de septiembre de 2017.

Presentación de póster: "Remoción de plaguicidas MCPA e imazapic de solución acuosa con materiales carbonosos". Spaltro A., Caputo M., Colasurdo D., Pila M., Ruiz D., Laurella S., Schiavoni M.M., Allegretti P.

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

---

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

- Proyecto de Incentivo acreditado UNLP "Remoción de Contaminantes de las Aguas del Arroyo del Gato Utilizando Bioadsorbentes". Código X776. Período: 2017-2019. \$26218 anuales.

- Proyecto de incentivo acreditado UNLP "Separación de Compuestos Orgánicos mediante Cromatografía Gaseosa y Cromatografía Líquida de Alta Resolución. Remoción de Contaminantes Presentes en la Vinaza previa Identificación de los Mismos". Código X783. Período 2017-2019. \$26218 anuales.

- Subsidio semiautomático investigador asociado CIC (Dra Allegretti): \$8000
- Subsidio semiautomático investigador asociado CIC (Dr Laurella): \$8000 (este subsidio fue adjudicado pero no ejecutado debido a problemas administrativos en CIC-BA)

**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 periodo 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 Dedicación Simple (Ordinario) en las materias Introducción a la Química y Química General e Inorgánica para Profesores del Departamento de Ciencias Exactas y Naturales de la FaHCE-UNLP.

Período: Julio de 2017 hasta la fecha.

Profesor Adjunto Dedicación Simple (Designado) en la materia Química Orgánica 1 (CIBEX-FCE-UNLP).

Período: Abril a junio de 2017.

Jefe de Trabajos Prácticos Dedicación Exclusiva (por Traspaso de Dedicación) en las diferentes cátedras del Área Química Orgánica Básica para las carreras Química, Bioquímica y Farmacia; y en la materia Mecanismos de Reacción, de la orientación Química Orgánica (Lic. en Química) de la FCE-UNLP.

Período: Agosto de 2015 hasta la fecha.

**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 periodo.*

---

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

ESTUDIO ESTRUCTURAL Y DE ADSORCIÓN SOBRE SÍLICE FUNCIONALIZADA DE LOS HERBICIDAS ATRAZINA, DICLOSULAM Y CLETODIM PARA SU ELIMINACIÓN DE AGUAS CONTAMINADAS

**OBJETIVOS**

1. Realización de estudios estructurales de los herbicidas con el objeto de evaluar las diferentes especies presentes en el equilibrio en solución y en fase gaseosa (previendo en futuro llevar a cabo estudios de contaminación de aire), a fin de poder predecir su reactividad en base a las estructuras dominantes. En solución se analizarán las especies predominantes en condiciones ambientales (a pH, temperatura y fuerza iónica típicas de la Provincia de Buenos Aires), y se realizará un estudio exhaustivo variando dichas condiciones.

2. Investigación y desarrollo de métodos alternativos que involucren adsorción (física y/o química) de atrazina, diclosulam y cletodim sobre sílice funcionalizada para su eliminación en agua. La funcionalización de la sílice resultará clave en el presente proyecto ya que, dado que los herbicidas en estudio presentan grupos funcionales polares, puede potenciarse la adsorción química o física por medio de la introducción de grupos adecuados sobre la superficie de la sílice.

## ANTECEDENTES

La República Argentina consume una gran cantidad de plaguicidas, con un mercado superior a los U\$ 2500 millones en 2016, siendo el segundo país de Latinoamérica después de Brasil.<sup>2</sup> El volumen de producción e importación de plaguicidas del año 2016 superó los 120 millones de Kg/L, con una clara distribución a favor de los herbicidas dado el clima predominante en nuestro país.

Tomando como referencia publicaciones del INTA,<sup>3</sup> los porcentajes de plaguicidas utilizados en Argentina en 2015 fueron (expresados en cantidad Kg/Lt): Herbicidas 87% (el cual está dividido en 65% glifosato y 22% otros herbicidas), insecticidas 6%, coadyuvantes 3%, fungicidas 3% y curasemillas 1%. Puede decirse entonces que los productos más aplicados en el campo argentino son los herbicidas, destacándose notablemente entre ellos el glifosato.

Los quince productos fitosanitarios más consumidos en Argentina<sup>3</sup> son los siguientes, en orden decreciente de volumen de aplicación: glifosato, 2,4-D, atrazina, diclosulam, cletodim, azoxystrobina + cyproconazol, rynaxypyr, haloxifop, clorpirifos, flubendiamide, trifloxystrobin + cyproconazol, pyraclostrobin + epoxiconazol, S-metolaclo, dicamba y tiametoxam + lambdacialotrina.

Análisis realizados en INTA<sup>4</sup> han permitido clasificar a los diferentes pesticidas según su toxicidad, caracterizando a glifosato e imidacloprid como “poco tóxicos”, y al resto como “tóxicos” (atrazina y epoxiconazol, con LC50-96hs de 1 a 10 mg/L) o “altamente tóxicos” (con LC50-96hs menores a 0,001 mg/L). Dentro de este último grupo se encuentran el resto de los plaguicidas de la lista.

En principio, consideraremos aquellos plaguicidas capaces de establecer equilibrios tautoméricos rápidos: atrazina, diclosulam y cletodim. A continuación, se da una breve descripción de los herbicidas objeto de estudio en el presente plan.

- La atrazina (6-cloro-N-2-etil-N-4-isopropil-1,3,5-triazina-2,4-diamina, Figura 1) ha sido usada ampliamente por décadas para suprimir las malezas en la producción de maíz. La contaminación del agua superficial por la atrazina y sus componentes descompuestos menos tóxicos ha causado preocupaciones ecológicas.

- El diclosulam (N-(2,6-dichlorofenil)-5-etoxi-7-fluoro[1,2,4]triazolo-[1,5-c]pirimidin-2-sulfonamida, Figura 2) pertenece al grupo de las triazolopirimidinas. La persistencia de este herbicida lo hace muy adecuado para el control de hierbas de hoja ancha en cultivos de soja.<sup>8</sup> Es usado desde la década del 90, aplicándose en forma masiva por primera vez en Argentina y Brasil; aunque actualmente es usado en todo el mundo.

Este herbicida es muy activo en dosis muy bajas. Además, tiene alta movilidad en suelo dado a que puede existir en forma aniónica y tiene bajo coeficiente de adsorción Koc.<sup>9</sup>

- El cletodim ((E,E)-2-[1-[(3-cloro-2-propenil)oxi]imino]propil]-5-[2-(etiltio)propil]-3-hidroxi-2-ciclohexan-1-ona, Figura 3) es un herbicida sistemático postemergente que pertenece a la familia de las ciclohexanodiona oximas. Es efectivo para el control de varias gramíneas en cultivos tales como soja, algodón, tabaco, entre otros. Este herbicida interfiere en la biosíntesis de ácidos grasos por medio de la inhibición de acetil-CoA carboxilasa.<sup>10</sup>

La primera parte del presente plan corresponde al estudio de posibles estructuras tautoméricas en estos tres herbicidas. El estudio de dichas estructuras en los herbicidas

radica en el hecho ampliamente conocido de que en muchas rutas metabólicas las especies reactivas son los tautómeros minoritarios y no las estructuras predominantes. En este sentido, el estudio de los equilibrios permite comprender algunos mecanismos de acción de los herbicidas, entre ellos su mecanismo de acción y toxicidad.

El grupo Determinación de Estructuras del CEDECOR (dirigido por la Dra. Allegretti) se ha especializado durante los últimos 15 años en el estudio de equilibrios rápidos (entre ellos los tautoméricos), lo cual se ha visto plasmado en más de 10 tesis doctorales y numerosas publicaciones en revistas internacionales y congresos.

En una segunda etapa, el presente plan contribuirá en la búsqueda de soluciones al grave problema planteado a través del estudio estructural exhaustivo de la atrazina y su eliminación de las aguas por filtración del material insoluble generado por su adsorción sobre partículas de sílice funcionalizadas.

En la actualidad, los métodos de eliminación de plaguicidas incluyen: 13

a) Tratamientos oxidativos, que tienen la capacidad de disminuir o eliminar toxicidad y volumen de contaminantes en aguas y suelo. Los oxidantes más comunes son cloro, ozono, dióxido de cloro, peróxido de hidrógeno. Otros métodos oxidativos son la reacción de Fenton y el proceso foto-Fenton.

b) Tratamientos físicos, que tienen mayor selectividad y posibilidad de concentrar contaminantes, pero que se acotan a la remediación de suelos. Entre ellos se encuentran la extracción con solventes, el lavado con surfactantes, la extracción con fluidos supercríticos y la adsorción.

c) Tratamientos biológicos con microorganismos naturales o cultivados especialmente para convertir los contaminantes en compuestos simples bajo condiciones ambientales especiales.

Otro tipo de clasificación ampliamente utilizada es la de tratamientos primarios, secundarios y terciarios. Los métodos físicoquímicos constituyen el tratamiento primario y, los biológicos los secundarios.

Las operaciones de tratamiento terciario, actualmente implantadas en las depuradoras, como ósmosis inversa o adsorción con carbón activado (procesos que obtienen una fracción diluida y otra muy concentrada en el contaminante, aunque no lo degradan), muy a menudo, parecen no ser suficientemente eficaces para conseguir aguas con un mínimo contenido en los contaminantes más persistentes (plaguicidas, fenoles, disolventes, etc.). Por ello, resultan necesarias otras etapas de tratamiento que logren este objetivo.

El grupo Determinación de Estructuras del CEDECOR se ha abocado recientemente al estudio de la adsorción como método de descontaminación de plaguicidas en soluciones acuosas (en colaboración con el Centro de Investigación de Medio Ambiente CIMA, perteneciente a la UNLP), especialmente sobre materiales carbonosos y sílice funcionalizada.

En este sentido se han llevado a cabo tres tesis doctorales (la del Dr. Agustín Spaltro terminada y las de los Lic. Matías Pila y Diego Colasurdo en ejecución, todas ellas referidas a adsorción de plaguicidas) y un trabajo posdoctoral (referido a la adsorción de carbendazim por parte del Dr. Laurella); se han publicado ya cinco trabajos en revistas internacionales (17-19) y más de 20 trabajos en congresos nacionales e internacionales.

## ACTIVIDADES Y METODOLOGÍA

- ESTUDIOS ESTRUCTURALES DE LOS PESTICIDAS SELECCIONADOS

Se realizará en principio un estudio estructural de cada uno de los herbicidas seleccionados (atrazina, diclosulam y cletodim) a fin de evaluar las diferentes especies

presentes en el equilibrio en solución y así poder predecir su reactividad en base a las estructuras dominantes. Dicho estudio se llevará a cabo por medio de Espectrometría de Masa (HPLC-EM), Resonancia Magnética Nuclear, Espectroscopía Infrarroja y Espectroscopía Raman.

Asimismo, se realizará un estudio en fase gaseosa por medio de Espectrometría de Masas (CG-EM) para posteriores estudios de contaminación de aire.

En la mayoría de los casos, los pesticidas son asequibles comercialmente. Solamente en algunos casos, cuando su costo sea muy elevado, se diseñarán las correspondientes estrategias sintéticas.

Una vez que los compuestos seleccionados se encuentren disponibles en el laboratorio, se llevará a cabo, en primer lugar, el estudio de las especies presentes en equilibrio en solución y, posteriormente, en fase gaseosa.

#### • ESTUDIO DE MECANISMOS Y NIVELES DE ADSORCIÓN DE HERBICIDAS SOBRE SÍLICE FUNCIONALIZADA

Como ya se mencionó, se propuso que los herbicidas en estudio presentan diversas estructuras en el equilibrio, y en base a ello se pretende determinar cuál es la especie dominante a fin de diseñar adsorbentes (partículas de sílice funcionalizada) con el objetivo de eliminar atrazina, diclosulam y cletodim adsorbidos sobre dichas partículas a través de filtración.

Los métodos a desarrollar se basarán en funcionalización de partículas de sílice de modo que las mismas interactúen de manera efectiva con las especies dominantes de los herbicidas. Una vez adsorbido, el herbicida es eliminado por filtración.

Con el fin de ponerla a prueba proponemos:

- Estudiar la adsorción de atrazina sobre partículas de sílice de diferente tamaño, a fin de comparar las isotermas en ambos casos y así determinar el tipo de interacción presente en el sistema adsorbente-atrazina.
- Funcionalizar las partículas de sílice con grupos carboxilos e hidroxilos a través de reacción de la sílica con hidroxiácidos carboxílicos y glicoles.
- Estudiar la adsorción de los herbicidas sobre las mencionadas partículas funcionalizadas.
- Caracterizar las partículas obtenidas.

Los métodos se basarán en la interacción entre los herbicidas y las partículas de sílice funcionalizada en suspensión de manera que las moléculas de herbicida se adsorban sobre las mismas y de esa manera puedan ser eliminados por filtración.

Con el fin de estudiar los diferentes aspectos del fenómeno de adsorción de la atrazina sobre partículas y nanopartículas de sílice funcionalizada, proponemos las siguientes etapas:

- A. Funcionalizar las partículas de sílice con moléculas que presenten grupos funcionales capaces de interactuar con atrazina, diclosulam y cletodim en solución, tomando en cuenta las estructuras moleculares predominantes de los mismos.
- B. Caracterizar las partículas de sílice funcionalizada.
- C. Adsorber los herbicidas sobre las mencionadas partículas funcionalizadas.
- D. Caracterizar las partículas obtenidas luego de la adsorción.

---

#### **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:
  - a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 22).

- b. 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 .....".
- c. 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](mailto: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.