

**Informe Bienal de Actividades de Investigación
Jornadas de Posgrado 2019**

**Contaminantes emergentes, su incidencia en la contaminación ambiental
cuando se encuentran en sistemas nanoestructurados**

Tesista: **Danielle Silva do Nascimento. Química Analítica**

Director: **Marcos Grünhut. Química Analítica. Departamento de Química.
Universidad Nacional del Sur.**

Las microemulsiones (MEs) son un tipo de sistemas nanoestructurados, transparentes y termodinámicamente estables, con una fase dispersa de tamaño entre 10 a 200nm [1]. Estos sistemas poseen la capacidad de estabilizar los compuestos lipofílicos, presentan alta difusión para distintas moléculas, y permiten la liberación de la sustancia encapsulada de una manera sostenida y controlada [2]. Debido a esas ventajas las microemulsiones de aceite en agua (O/W) son utilizadas cuando el componente activo tiene propiedades lipofílicas.

El octil metoxicinamato (OMC) es un filtro solar orgánico ampliamente utilizado como protector solar en formulaciones tópicas, debido a su propiedad intrínseca de lipofilidad es ideal para su uso en productos resistentes al agua [3]. El OMC se utiliza principalmente como un filtro UVB, aunque su espectro de absorción se extiende en el UVA (320 nm-400 nm). El OMC adicionado en formulaciones tiene una variación de concentración entre 0,1% a 10% (w/w), de acuerdo con los niveles máximos establecidos por Administración Nacional de Medicamentos, Alimentos y Tecnología Médica (ANMAT).

Para el análisis in situ de ese filtro solar sin ningún pre-tratamiento fue utilizada la Espectroscopia Raman Confocal (CR) combinada con herramientas quimiométricas para clasificación y cuantificación [4]. Las formulaciones fueron preparadas con 29,2 % (w/w) de 3:1 mezcla de etanol (co-surfactante) y decaetilenglicol mono-dodecil éter (surfactante), 1.5 % (w/w) de ácido oleico (fase de aceite) y 60 % (w/w) de agua [5] con concentraciones entre 1,0; 3,0; 5,0; 7,0; y 10,0 % (w/w) de OMC.

Las MEs fueron evaluadas mediante CR obteniendo imágenes y datos espectrales registrados entre 600 y 1700 cm^{-1} . Además, fueron utilizados diferentes métodos de clasificación tales como análisis lineal discriminante (LDA) modelado con previa selección

de variables mediante el algoritmo de las proyecciones sucesivas (SPA) y modelado por analogía de clases (SIMCA); para la cuantificación de las diferentes concentraciones de OMC en la formulación fue utilizado método de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS).

Se observa en la Fig. 1a el modelo de clasificación con diferentes porcentajes de OMC en la formulación utilizando SPA-LDA y en la Fig. 1b la curva de calibración con los valores de predicción obtenidos por PLS. Los resultados de clasificación obtenidos por los modelos SPA-LDA y SIMCA para el conjunto de predicción de 15 muestras, presentaron apenas un error de predicción con una cantidad de 5 variables seleccionadas y 4 componentes principales para los respectivos modelos. En el caso del modelado PLS fueron utilizadas 6 variables latentes para la construcción del modelo de calibración, obteniendo valores óptimos de RMSEP (0,2562% w/w), REP (0,351%) y R^2 (0,994), con una satisfactoria predicción de las muestras.

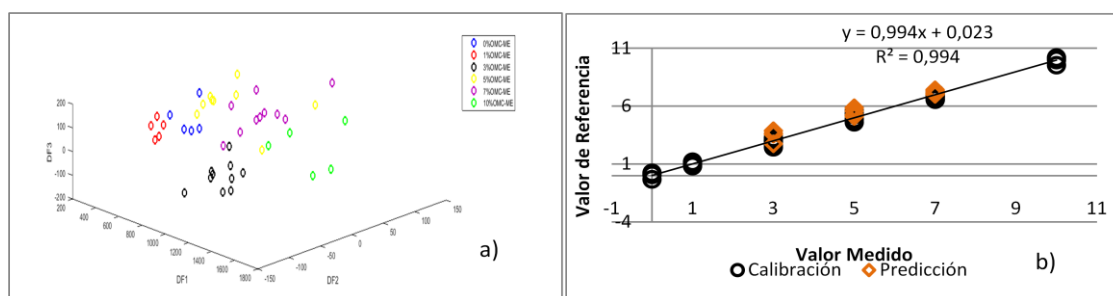


Figura 1. a) Gráfico de funciones discriminantes de Fisher para el modelo SPA-LDA. b) Curva de calibración con conjunto de predicción externo para el modelo PLS.

[1] D.P. Acharya, P.G. Hartley, Progress in microemulsion characterization, *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* 17 (2012) 274-280.

[2] V. Volpe, D.S. Nascimento, M. Insausti, M. Grünhut, Octyl p -methoxycinnamate loaded microemulsion based on *Ocimum basilicum* essential oil . Characterization and analytical studies for potential cosmetic applications. *Colloids Surf. A.*, 546 (2018) 285-292.

[3] C. Cole, Sunscreen Formulation: Optimizing Efficacy of UVB and UVA Protection, in *Principles and Practice of Photoprotection*, Springer, Switzerland, 2016, pp 275-287.

[4] W.A.F. Wan Mohamad, R. Buckow, M. Augustin, D. McNaughton, *In situ* quantification of β -carotene partitioning in oil-in-water emulsions by confocal Raman microscopy, *Food Chemistry* 233 (2017) 197–203.

[5] D.S. Nascimento, M. Insausti, B.S.F. Band, M. Grünhut, Photolysis study of octyl p-methoxycinnamate loaded microemulsion by molecular fluorescence and chemometric approach, *Spectrochim. Acta A*, 191 (2018) 277-282.