

# Espectroscopia Raman amplificada por superfície e MCR-ALS na determinação de nicotina

Mónica Mamián-López (PG)<sup>1\*</sup>, Ronei J. Poppi (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UNICAMP- Instituto de Química-IQ- Caixa Postal 6154- CEP 13084-971-Campinas-São Paulo-Brasil.

\* [monlopez@iqm.unicamp.br](mailto:monlopez@iqm.unicamp.br)

Palavras Chave: SERS, calibração multivariada, efeito de matriz, nicotina.

## Introdução

O efeito SERS (*Surface Enhanced Raman Spectroscopy*), originado pela adsorção de moléculas na superfície de nanopartículas metálicas, tem sido empregado para amplificar a intensidade dos sinais em espectroscopia Raman<sup>1</sup>. Podem ser obtidos fatores de amplificação da ordem de até  $10^{11}$ <sup>2</sup>, o qual somado às características dos materiais nanoparticulados e à utilização de métodos de calibração multivariados<sup>3,4</sup>, facilita a detecção e quantificação de uma vasta quantidade de espécies de importância bioanalítica. Uma das substâncias de grande interesse é o alcalóide nicotina, constituinte principal da planta de tabaco cujo efeito psicoativo e estimulante do sistema nervoso central, produz severa dependência<sup>5</sup>.

## Resultados e Discussão

Neste trabalho determinou-se a concentração de nicotina em amostras de urina diluída a 10%, empregando uma suspensão coloidal de ouro preparada pelo método de Lee-Miesel<sup>6</sup>, previamente ativada com solução de NaCl 0.1 M e métodos de calibração multivariada. Apesar das soluções de nicotina apresentarem espectros SERS com bandas de alta intensidade, quando presente em uma matriz complexa como a urina, o efeito de matriz é observado na resposta instrumental, fazendo com que seja difícil a quantificação na matriz original. A utilização do algoritmo de Resolução multivariada de curvas- Mínimos quadrados alternados, MCR-ALS (*Multivariate Curve Resolution - Alternating Least Squares*), permitiu recuperar a resposta do analito puro a partir do sinal original contendo a resposta da espécie de interesse e os interferentes. Para a quantificação aplicou-se o método de adição padrão a partir da matriz de concentrações otimizada pelo MCR-ALS, obtendo-se a curva da figura 1.

Com o modelo de calibração descrito, foi analisada (em triplicata) uma amostra de concentração de  $0.1 \text{ mgL}^{-1}$ , correspondente a  $1 \text{ mgL}^{-1}$  na urina original. O limite de detecção calculado é  $0.02 \text{ mgL}^{-1}$  e o erro da previsão, 8.05%. A precisão total representada pelo desvio padrão das respostas é de  $2.3 \times 10^{-04}$ .

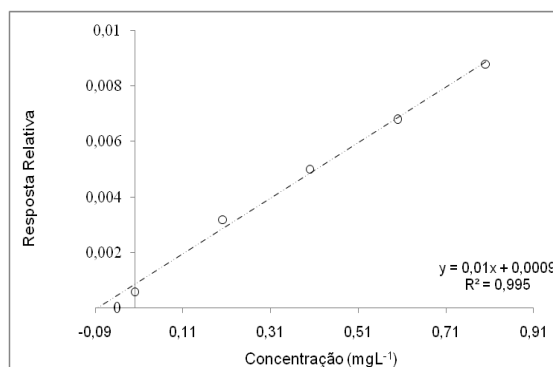


Figura 1. Curva de adição padrão para a determinação de nicotina em amostras de urina

## Conclusões

A utilização do método MCR-ALS aliado à espectroscopia SERS, mostrou ser uma estratégia útil na minimização dos problemas gerados pelo efeito de matriz na determinação de nicotina em urina. Além disso, as análises são feitas com um mínimo preparo e manipulação da amostra.

## Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro do INCT de bioanalítica, CAPES e ao Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas pelo apoio na participação na 34<sup>a</sup> RASBQ.

<sup>1</sup>Zhu, X.; Yang, H.; Wang, N.; Zhang, R.; Song, W.; Sun, Y.; Duan, G.; Ding, W.; Zhang, Z. *J. Colloid Interface Sci.* **2010**, 342, 571.

<sup>2</sup>Cañamares, M.B.; García-Ramos, M.V.; Sanchez-Cortes, S.; Castillejo, M.; Oujja, M. *J. Colloid Interface Sci.* **2008**, 323, 103.

<sup>3</sup>Jaumot, J.; Gargallo, R.; de Juan, A.; Tauler, R. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* **2005**, 76, 101.

<sup>4</sup>Saurina, J.; Leal, C.; Compañó, R.; Granados, M.; Prat, M.D.; Tauler, R. *Anal. Chim. Acta.* **2001**, 432, 241.

<sup>5</sup>Miller, E.; Norris, H.R.; Rollins, D.; Tiffany, S.; Wilkins, D. *J. Chrom. B* **2010**, 878, 725.