



DETECCIÓN SERS DE FTALOCIANINAS DE COBRE MEDIANTE PLATAFORMAS FLEXIBLES DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA Y MODELADO COMPUTACIONAL

Erika Valdivia, Marcos Leone, A. Lorena Picone, Carlos O. Della Védova, Rosana M. Romano,

CEQUINOR (UNLP, CCT-CONICET La Plata, asociado a CIC-PBA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata. Blvd. 120 N°1465, La Plata (1900), Argentina.

Correo electrónico de contacto: erikavaldivia@quimica.unlp.edu.ar

El desarrollo de métodos no destructivos para detectar pigmentos en obras de arte es fundamental para su conservación. En este contexto, nuestro grupo trabaja en plataformas flexibles basadas en nanopartículas de plata embebidas en geles para la detección por espectroscopia Raman intensificada por superficie (SERS). Las ftalocianinas de cobre (azul y verde) fueron empleadas durante el siglo XX en restauraciones, no siempre documentadas, como en una obra de Tintoretto perteneciente al Museo Provincial de Bellas Artes Emilio Pettoruti estudiada por nuestro grupo [1]. Al haber sido sintetizadas en la primera mitad del siglo XX [2], su presencia evidencia intervenciones, restauraciones o repintes posteriores a la creación original.

En este trabajo se prepararon distintas plataformas (combinando nanopartículas de plata esféricas (AgNPs) o nanoestrellas (AgNSs) con geles de agar, carbomer, alginato o goma xántica) y se ensayaron tanto soluciones altamente diluidas (la solubilidad de las ftalocianinas de Cu reportada en diferentes solventes es inferior a 10^{-8} M) como a partir de extracciones directas sobre pinturas preparadas en el laboratorio. Los mejores resultados se obtuvieron con un gel de goma xántica conteniendo AgNPs. Para interpretar la interacción entre las ftalocianinas y el sustrato, se realizaron simulaciones computacionales con los programas ORCA 6.1 (optimización de la geometría de la molécula) y GROMACS (disposición sobre la superficie de Ag). Los resultados sugieren que en la ftalocianina azul, las vibraciones detectadas corresponden a modos en el plano molecular con orientación mayoritariamente paralela a la superficie y anillos bencénicos ligeramente inclinados, mientras que la ftalocianina verde se posiciona de forma prácticamente plana respecto al sustrato.

Agradecimientos. A la UNLP (UNLP 11/X971) y al CONICET (PIP 0352) por el apoyo financiero.

REFERENCIAS

- [1] R. M. Romano, J. Pellizzari, F. L. Ruvituso, G. Pietrodangelo, A. L. Picone, N. G. Rossi, C. O. Della Védova. *J. Mol. Struct.*, **2025**, 1321, 140163–140181.
[2] R. P Linstead. *J. Chem. Soc.*, **1934**, 1016–1017.