

## 226 Espectroscopia Raman y SERS del ácido 2-tio-5-nitrobenzoico con nanopartículas de oro y plata: estudio teórico y experimental

A. R. Guerrero<sup>1</sup>, J. A. Squella<sup>2</sup>, M. J. Kogan<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Depto. de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santos Dumont 964, Independencia, Santiago, Chile; Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS).

<sup>2</sup>Depto. de Química Orgánica y Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santos Dumont 964, Independencia, Santiago, Chile

Dirección de correo del autor correspondiente: arielrgh@gmail.com

El ácido 2-tio-5-nitrobenzoico (TNB) y su molécula paterna, el dímero ácido 5.5'-ditio-bis(nitrobenzoico) pueden usarse como moléculas reportadoras Raman para aplicaciones biológicas de SERS (*Surface-Enhanced Raman Scattering*). [1] Sin embargo, un estudio completo teórico y experimental de estas moléculas no ha sido reportado previamente en la literatura. Se reportan aquí los espectros Raman y SERS de estas moléculas, TNB y DTNB, usando nanopartículas de oro y plata (Figura 1). Se ha hecho una asignación vibracional completa con la ayuda de cálculos de teoría de funcionales de densidad (*density functional theory*, DFT) al nivel de teoría B3LYP/6-311+(d,p) y la base LANL2DZ y potenciales efectivos de núcleo para los átomos de oro y de plata, y modelo de continuo polarizable usando agua como solvente. Se sintetizaron nanopartículas de oro de aproximadamente 50 nm de diámetro, y nanopartículas de plata de aproximadamente 60 nm por métodos de reducción con citrato sódico [2,3]. Estas nanopartículas se caracterizaron por espectroscopia de absorción en el visible, dispersión dinámica de la luz y microscopía electrónica de transmisión y barrido, como se ha hecho previamente en nuestro grupo. [4]

Fue posible obtener espectros SERS de las especies usando nanopartículas de oro y plata. Los mejores factores de amplificación se obtuvieron induciendo agregación parcial de las nanopartículas. Los resultados experimentales están en buen acuerdo con el estudio teórico. Al presente estamos investigando

estos sistemas de nanopartículas funcionalizadas para su uso en la detección de biomarcadores utilizando la técnica de SERS.

Los autores agradecen el financiamiento de los proyectos FONDAP No. 15130011 y FONDECYT No. 1130425.

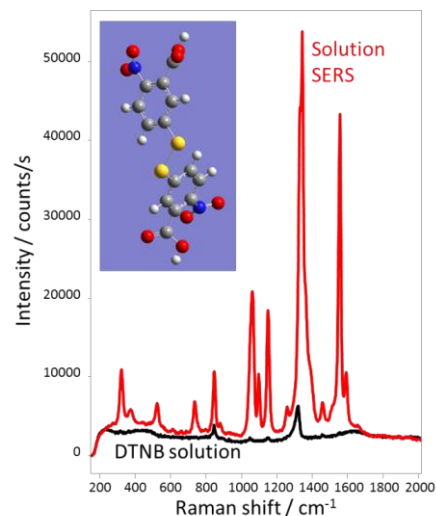


Figura 1. Espectros Raman de referencia y SERS en solución acuosa de DTNB  $4.2 \times 10^{-4}$  M utilizando nanopartículas de plata. Láser: 532 nm

### Referencias

- [1] B. Guven, N. Basaran-Akgul, E. Temur, U. Tamer, and I. H. Boyac, *Analyst* **136**, 740 (2011).
- [2] G. Frens, *Nature, Phys. Sci.* **241**, 20 (1973).
- [3] P. C. Lee and D. Meisel, *J. Phys. Chem.* **86**, 3391 (1982).
- [4] A. Riveros, K. Dadlani, E. Salas, L. Caballero, F. Melo, and M. J. Kogan, *J. Biomater. Tissue Eng.* **3**, 4 (2013).