

RESUM

La present Tesi Doctoral titulada "*Nanopartícules de sílice com a suport inorgànic en la preparació de materials híbrids per a la detecció òptica de anions*" es basa en l'ús de conceptes de química supramolecular i de química de materials per a la preparació de sistemes sensors híbrids amb capacitat per a reconèixer ions mitjançant canvis de color i de fluorescència.

El primer material sensor desenvolupat està basat en nanopartícules de sílice funcionalitzades amb espirobenzopirans (unitat indicadora) i amb tiourees (unitat coordinant). A les nanopartícules bifuncionalitzades l'espiropirà està en la seua forma polar oberta (merocianina de color vermell). Quan coordinen les tiourees amb carboxilats de cadena llarga (octanoat, decanoat i dodecanoat) es forma un entorn apolar al voltant de la unitat indicadora que afavoreix la seua transformació de la forma oberta a l'apolar espirocíclica tancada amb el consegüent canvi de color.

A la segona part de la Tesi s'han preparat nanopartícules de sílice funcionalitzades amb antracè, com a unitat indicadora, i amb dos tiourees diferents, com unitats coordinants d'anions. Suspensions de les nanopartícules bifuncionalitzades en acetonitril mostren la típica emissió estructurada del'antracè. En afegir diferents anions a la suspensió de les nanopartícules s'obté un augment de fluorescència

(amb Cl^- , Br^- , H_2PO_4^- , acetat i benzoat) o una desactivació de la mateixa (F^- i CN^-).

Finalment es prepararen nanopartícules de sílicie funcionalitzades amb terpiridines, com a unitat coordinant, i amb sulforodamina B, com a unitat indicadora. La coordinació de cations metàl·lics de transició (Fe^{3+} , Hg^{2+} , Cu^{2+} , Ni^{2+} i Pb^{2+}) amb les terpiridines va donar lloc a una desactivació important de l'emissió de la sulforodamina B unida covalentment al material (95% de la inicial). En un segon pas, es va estudiar la capacitat de certs anions (H_2PO_4^- , HSO_4^- , F^- , Cl^- , Br^- , I^- i NO_3^-) de desplaçar al metall coordinat amb la subsegüent regeneració de l'emissió de la sulforodamina. Aplicant l'anàlisi de components principals (PCA) es va aconseguir la discriminació de tots els anions estudiats. A més, les nanopartícules tractades amb el catió Pb^{2+} van donar una resposta selectiva amb l'anió H_2PO_4^- .