

## “Avances para el análisis de mezclas complejas mediante técnicas cromatográficas multidimensionales”

Autor: **Cipriano Carrero Carralero**

Directores: **Lourdes Ramos y María Luz Sanz**

Instituto de Química Orgánica General (CSIC)

Universidad Autónoma de Madrid, 8 de junio de 2018



### Resumen:

La cromatografía de gases (GC) es una técnica analítica ampliamente aceptada para la resolución de mezclas de relativa complejidad. En GC la identificación se basa en la comparación de los tiempos de retención de los analitos con los de patrones adecuados analizados en las mismas condiciones. Sin embargo, cuando la complejidad de las mezclas estudiadas aumenta, la posibilidad de coelución de los analitos de interés con otros componentes de la mezcla o de la matriz presentes en el extracto también aumenta. Es entonces cuando se hace necesario incorporar un criterio de separación o identificación adicional para evitar imprecisiones en la determinación de los analitos. Las técnicas multidimensionales resultantes permiten una determinación más fidedigna de los compuestos, al posibilitar al menos dos criterios independientes de identificación. En el caso de las técnicas cromatográficas, la multidimensionalidad puede venir dada, por ejemplo, por su acoplamiento con una segunda técnica de separación cromatográfica o con una técnica de espectrometría de masas (MS) que aporte información estructural sobre el analito que eluye de la columna cromatográfica a un tiempo determinado.

En línea con estas consideraciones, el objetivo principal de esta tesis doctoral ha sido la evaluación del potencial de las técnicas cromatográficas multidimensionales basadas en los acoplamientos GC-Q MS y la cromatografía de gases completa en dos dimensiones-espectrometría de masas de tiempo de vuelo (GCxGC-ToF MS) para la resolución de problemas de diversa índole en los campos alimentario y ambiental. Con este fin, se han planteado una serie de estudios concretos en los que, bien por la complejidad de la mezcla a analizar o bien por el elevado número de analitos a determinar y la similitud de sus estructuras químicas, se requería un aumento en la resolución y/o selectividad de la determinación analítica respecto a la aportada por la correspondiente técnica cromatográfica monodimensional. Los estudios considerados incluyeron: (i) la extracción y análisis de carbohidratos y glicósidos bioactivos de muestras vegetales, (ii) la caracterización de lixiviados de envases alimentarios, y (iii) la caracterización de los lípidos y carbohidratos de bajo peso molecular de la materia orgánica del suelo.

De manera genérica, se concluye que los trabajos desarrollados en el marco de esta Tesis Doctoral representan un avance en el estado general de los conocimientos en relación con las técnicas cromatográficas multidimensionales (en particular, GC-Q MS y GCxGC-ToF MS) al proponer soluciones a problemas complejos de relevancia ambiental y alimentaria.