

# CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

**SECYTA**

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE  
CROMATOGRAFÍA  
Y TÉCNICAS AFINES

BOLETIN DE LA SECYTA  
VOLUMEN 32 NÚM. 2 (2011)  
WWW.SECYTA.ORG

**32**

El nuevo equipo de

**DIONEX**

**UHPLC<sup>+</sup>**  
focused



**La tecnología UHPLC  
ahora más accesible**

[www.vertex.es](http://www.vertex.es)



ISO 9001:2008



**VERTEX**  
Technics

Barcelona: C/Comercio, 12 - 08902 L'Hospitalet de Llob. - Tel: 932 233 333 - Fax: 932 232 220  
Madrid: C/ Sofía 177 J - Local C - 28022 Madrid - Tel: 913 240 014 - Fax: 913 134 753  
Bilbao: 944 471 999 - Málaga: 952 398 854 - Vigo: 986 200 366

## CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

Madrid, Madrid, Diciembre de 2011 Vol. 32, núm. 2

ISSN 1132-1369

Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (<http://www.secyta.org>)

### ÍNDICE

46 **EDITORIAL**

#### **ARTÍCULO**

47 Métodos de extracción, enriquecimiento y análisis de iminoazúcares. *S. Rodríguez-Sánchez.*

#### **NOTICIAS DE LA SECyTA**

56 XI Reunión científica de la SECyTA (40ª Reunión científica del GCTA)

57 VII Premios “José Antonio García Domínguez”

61 Homenaje a varios socios

66 Asamblea General de la SECyTA

75 Nuevos socios

#### **INFORMACIONES**

78 Congresos celebrados

83 Calendario de actividades

#### **INFORMACIÓN BIBLIOGRÁFICA**

84 Artículos de interés

#### **DE NUESTRAS EMPRESAS COLABORADORAS**

88 Novedades técnicas

-----  
**Redacción:** Lourdes Ramos ([lramos@iqog.csic.es](mailto:lramos@iqog.csic.es))

María Luz Sanz ([mlsanz@iqog.csic.es](mailto:mlsanz@iqog.csic.es))

Instituto de Química Orgánica General (CSIC).

Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid. Tel. 91 562 29 00

Fco. Javier Moreno ([javier.moreno@csic.es](mailto:javier.moreno@csic.es))

José Ángel Gómez Ruiz ([joseangel.gomez.ruiz@csic.es](mailto:joseangel.gomez.ruiz@csic.es))

Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL, CSIC-UAM).

Nicolás Cabrera 9, Campus de la Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid.

Tel. 91 001 79 00

**Publicidad:** Mario Fernández ([mario@iqog.csic.es](mailto:mario@iqog.csic.es))

Instituto de Química Orgánica General (CSIC).

Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid. Tel. 91 562 29 00

**Depósito legal:** M-1902-1975

**Diseño, preimpresión e impresión:** Helios, S.L. • Duque de Sevilla 16 • 28002 Madrid • Tel. 91 768 49 50

**Diseño de portada:** Pau de Riba

Los autores son responsables del contenido de sus artículos.

## LA QUÍMICA VA BIEN

Queridos compañeros y compañeras,

En diversos comentarios editoriales anteriores hemos tratado el tema de la crisis económica que nos sacude. Sin embargo, hay que destacar que ciertos sectores como el químico tienen un buen nivel de actividad económica. Este sector representa el 10-15% del producto interior bruto español. Actualmente está facturando a un ritmo importante y tiene una actividad exportadora muy notable. La crisis le afecta por los problemas generales de financiación pero su nivel de ventas es importante. Ello representa un contraste fuerte con otros sectores económicos como la construcción, que está hundido y no parece que se vaya a recuperar a corto/medio plazo.

Es obvio que algunas empresas del sector químico han pasado por dificultades. Ha habido remodelaciones y fusiones pero el sector en conjunto está en un buen nivel competitivo y con capacidad de exportación. Uno de los aspectos importantes del cambio ha sido su capacidad de incorporar conocimiento. Los doctores, licenciados e ingenieros formados en las universidades y centros de investigación españoles han tenido un papel importante en ello. Los trabajos científicos desarrollados en dichos centros y universidades han contribuido a mejorar la tecnología de las empresas. Es difícil imaginar que el sector químico hubiese llegado a los niveles de reorganización y readaptación conseguidos sin esta transferencia técnica.

La química analítica y en particular la cromatografía y técnicas afines han tenido un papel muy relevante en este contexto. Muchos científicos españoles ocupan lugares destacados en este campo a nivel europeo. Un aspecto importante de dicho desarrollo comprende el avance hacia una química de calidad. Dicha química requiere el control de los procesos y reacciones químicas en cualquier etapa de fabricación y también proporciona las herramientas necesarias para asegurar un medio ambiente saludable y una alimentación libre de contaminantes y de buena calidad. Sin los desarrollos alcanzados en nuestra disciplina esto no hubiera sido posible.

En estos tiempos que vienen todas las sociedades europeas están replanteando sus ámbitos de inversión preferente. Se tienen que priorizar aquellos que pueden producir retornos a corto plazo. El concepto de inversión incluye la recuperación del dinero invertido, por lo menos en parte. De lo contrario se trata de una donación. La inversión en cromatografía, espectrometría de masas y otras técnicas afines tiene un retorno claro en el sector químico y en la capacidad de nuestros investigadores de participar o conseguir proyectos científicos competitivos. La inversión en estas disciplinas constituye una herramienta muy importante para asegurar el desarrollo del sector químico y proporciona un retorno económico claro, además de potenciar el desarrollo científico y técnico.

**Joan O. Grimalt y María José González Carlos**  
*Presidentes saliente y entrante de la SECyTA*



# Métodos de extracción, enriquecimiento y análisis de iminoazúcares.

S. Rodríguez-Sánchez

Instituto de Química Orgánica General (CSIC). Juan de la Cierva, 3. 28006, Madrid.

E-mail: sonia.rodriguez@iqog.csic.es. Tel.: (+34) 91 2587451. Fax: (+34) 91 5644853.

## 1. INTRODUCCIÓN

Los iminoazúcares, también llamados azazúcares y polihidroxicarbohidratos son monosacáridos en los que el átomo de oxígeno del anillo se ha reemplazado por un átomo de nitrógeno. Los iminoazúcares se encuentran presentes en numerosas familias de plantas (*Moraceae*, *Leguminosae*, *Hyacinthaceae*, etc.) y en diversos géneros de microorganismos (*Streptomyces*, *Bacillus*, etc.) (Watson y col., 2001), pero también se pueden obtener mediante síntesis química (Clapés y col., 2010).

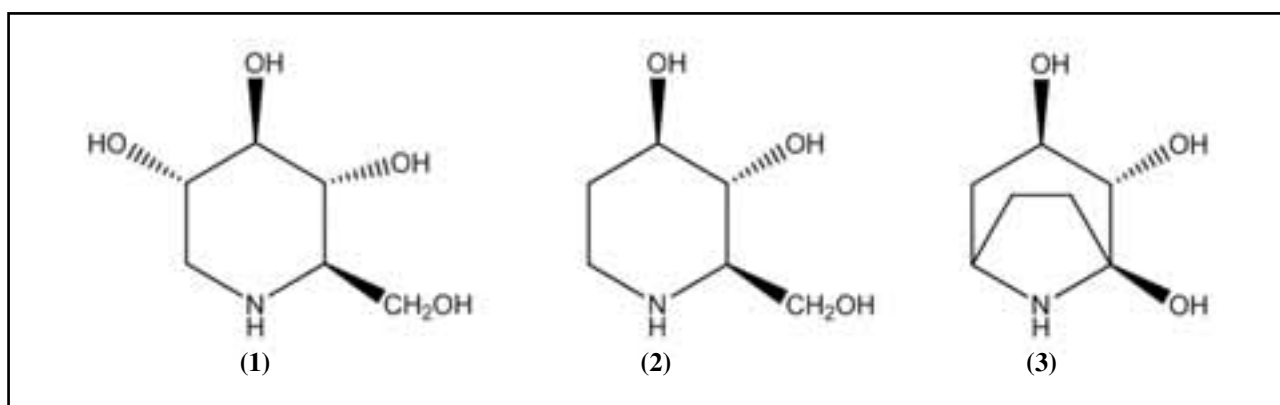
A todos ellos se les atribuyen numerosas actividades ecológicas y farmacológicas (Martin y Col., 2003), siendo su actividad antiglicosidasa una de las más estudiadas (Molyneux y col., 2002). Dicha actividad se basa en la mencionada analogía estructural de los iminoazúcares con los carbohidratos sencillos, lo que permite que puedan ocupar el lugar de éstos en reacciones enzimáticas catalizadas por glicosidasas, produciendo así la inhibición de las mismas. Es por ello que la actividad antiglicosidasa de los iminoazúcares les confiere un enorme potencial terapéutico como candidatos para el tratamiento de numerosas enfermedades relacionadas con la absorción de carbohidratos, tales como obesidad y diabetes, así como frente a otras en las que también intervienen las glicosidasas, como cáncer, infecciones virales, etc. (Asano y col., 2000; Watson y col., 2001; Yokoyama y col., 2007; Kato y col., 2008).

De entre todos los polihidroxicarbohidratos, este artículo se va a centrar en aquellos iminoazúcares generalmente analizados en extractos de origen vegetal, tales como fagomina (1,2,5-tridesoxi-1,5-imino-D-arabino-hexitol), 1-deoxinojirimicina (1,5-diesoxi-1,5-imino-D-glucitol) (DNJ) o calisteginas (**Figura 1**).

La DNJ es un derivado polihidroxicarbohidrato de la piperidina que se considera un análogo estructural de la D-glucosa, en la que el oxígeno endocíclico ha sido substituido por un grupo -NH (Kimura y col., 2004; Afarinkia y col., 2005).

La DNJ fue sintetizada por primera vez por Paulsen y col. en 1967, aunque desde entonces se han descubierto nuevas rutas, entre ellas la síntesis asimétrica de sus diferentes diastereoisómeros (Schaller y col., 1998).

Este iminoazúcar, uno de los inhibidores más potentes de  $\alpha$ -glucosidasas (Oku y col., 2006), se ha encontrado también en microorganismos de los géneros *Streptomyces* y *Bacillus* (Asano y col., 2000), así como en especies vegetales tales como *Hyacinthus orientalis* (Asano y col., 1998), *Lonchocarpus sp.* (Evans y col., 1985; Magalhães y col., 2002), etc., siendo descrita su presencia en cantidades relativamente elevadas en frutos, hojas y raíces de *Morus nigra* (Evans y col., 1985), *Morus bombycis* (Asano y col., 1994b) o *Morus alba* L. (Asano y col., 2001).



**Figura 1.** Estructuras químicas de iminoazúcares: DNJ (1); fagomina (2); calistegina A<sub>3</sub> (3).

La fagomina se encuentra en diversas plantas de las familias *Leguminosae* (*Castanospermum australe*, *Xanthocercis zambesiaca*), *Solanaceae* (*Lycium chinese*) y *Polygonaceae* (*Fagopyrum esculentum*) (Yokoyama y col., 2007; Fu y col., 2009), siendo por primera vez descrita su presencia en esta última, lo que da lugar a su nombre.

Existen diversos procedimientos para su síntesis, algunos de los cuales permiten su obtención enantioespecífica (enantiómeros D- y L-) (Banba y col., 2001; Yokoyama y col., 2007). Entre sus propiedades biológicas destaca su actividad frente a  $\alpha$ -glucosidasas intestinales de mamíferos (Asano y col., 1994a), además de ser un potenciador de la secreción de insulina (Taniguchi y col., 1998).

Las calisteginas son un grupo de alcaloides con esqueleto de nortropano (8-azabicyclo[3,2,1]octano) polihidroxilado en diferentes posiciones. Fueron descubiertas en *Calystegia sepium* por Tepfer y col. en 1988, encontrándose posteriormente en otras convolvuláceas (Schimming y col., 1998), solanáceas (Dräger, 2004) y moráceas (Molyneux y col., 1996).

Pueden clasificarse en varias subcategorías dependiendo del número de grupos hidroxilo presentes a la molécula; así se pueden encontrar calisteginas tipo A, B o C con tres, cuatro o cinco grupos hidroxilo, respectivamente (Dräger, 1995; Brock y col., 2005).

Por su similitud estructural con algunos alcaloides inhibidores de glicosidasas, resultan ser potentes y selectivos inhibidores de  $\beta$ -glucosidasas y  $\beta$ -galactosidasas (Molyneux y col., 1993; Boyer y col., 1994; Dräger, 2004; Kvasnicka y col., 2008), lo que ha despertado un creciente interés por su obtención sintética. Así, de entre los estudios descritos hasta el momento, la mayor parte de ellos se han centrado en la obtención de la calistegina B<sub>2</sub>, que se ha sintetizado enantioselectivamente (Duclos y col., 1992; Boyer y Lallemand, 1994; Soulié y col., 1996;), aunque también se ha descrito la síntesis de la calistegina A<sub>7</sub> a partir de un metil- $\alpha$ -D-glucopiranosido (Csuk y col., 2008), de la calistegina A<sub>3</sub> a partir de glucosa (Monrad y col., 2009), así como de la calistegina B<sub>4</sub> a partir de D-xilosa (Moosophon y col., 2010).

Dada la potencial aplicación como aditivos en la industria alimentaria, y como alternativa al procedimiento sintético, recientemente ha cobrado gran auge la búsqueda de nuevas metodologías de extracción y enriquecimiento de iminoazúcares a partir de fuentes naturales, principalmente de especies vegetales. Así, en países como Turquía, Grecia (Ercisli y col., 2006) y, sobre todo, Japón (Butt y col., 2008), se comercializan ya como ali-

mentos funcionales o suplementos alimenticios varios productos enriquecidos en DNJ procedente de extracto de morera (Kimura y col., 2004).

## 2. EXTRACCIÓN Y ENRIQUECIMIENTO

Existen numerosos trabajos en los que se describen detalladamente los procesos de extracción, enriquecimiento y, en algunos casos, purificación de iminoazúcares y de entre todos ellos cabe citar una amplia revisión realizada por Molineux y col. (2002).

En los procedimientos basados en la utilización de disolventes, en general la extracción de estos compuestos, y más concretamente de DNJ y fagomina, se lleva a cabo a partir de la planta molida, previamente secada al aire o liofilizada, empleando disoluciones entre 25-70% de metanol o etanol en agua (Nuengchamnonng y col., 2007; Kato y col., 2008) y, en ocasiones, sólo con agua fría o caliente (Yoshihashi y col., 2010). Sin embargo, este procedimiento presenta como desventaja la coextracción de otros compuestos polares como azúcares y aminoácidos. En algunos casos, puede ser necesario un paso previo a la extracción con objeto de separar grasas y ceras de la matriz vegetal, ya que éstas pueden encapsular a los iminoazúcares y disminuir su solubilidad. Una de estas opciones consiste en someter previamente la muestra a una extracción sucesiva mediante Soxhlet con éter de petróleo, diclorometano y metanol; este último extraería los compuestos de interés (Magalhães y col., 2002).

También se ha descrito la extracción con agua acidulada, en agitación y seguida de centrifugación (Dräger, 1995; Kim y col., 2003; Rodríguez-Sánchez, 2011). En este caso, aunque no se consigue una mayor eficacia en comparación con la extracción continua con Soxhlet, sí que se asegura la estabilidad de ciertas pirrolidinas que se degradan a pH más básicos (Fellows y col., 1989; Molyneux y col., 2002).

Alternativamente, se ha aplicado la extracción por ultrasonidos empleando acetonitrilo-agua (50:50 v/v con acetato amónico 6,5 mM a pH 5.5) seguida de centrifugación para la extracción de iminoazúcares (DNJ y fagomina) en hojas de morera (*M. alba* y *M. bombycis*) (Kimura y col., 2004). Asimismo, recientemente, nuestro grupo de investigación (Rodríguez-Sánchez y col., 2011) ha desarrollado un método mediante extracción con líquidos presurizados para la extracción de dichos iminoazúcares a partir de hojas de este vegetal, obteniendo rendimientos similares a los de la extracción convencional pero en un tiempo de extracción notablemente menor.

Es necesario señalar que, si bien los iminoazúcares no son muy abundantes en las diferentes matrices vegetales en las que se encuentran, no excediendo el 0,1 % en la mayoría de los casos (Molyneux y col., 2002), los rendimientos de extracción de muchos de los métodos arriba descritos una vez optimizados son, en general, bastante elevados, obteniéndose porcentajes de recuperación entre 86-99 % (Kim y col., 2003; Nuengchamng y col., 2007; Yoshihashi y col., 2010).

Por otra parte, cabe destacar que con la mayoría de estos procedimientos se produce una extracción conjunta de compuestos en principio no deseados, como por ejemplo carbohidratos, que podrían interferir con la capacidad de los iminoazúcares para inhibir las glicosidasas. Por ello, se hace casi imprescindible una etapa de purificación de los extractos en la que separar los iminoazúcares de dichos carbohidratos no deseados, siendo una de las mejores opciones para ello el empleo de la cromatografía de intercambio iónico. Se han empleado diversas resinas aniónicas y catiónicas, siendo las más comunes la Dowex 50 y la Amberlite GC120 en sus formas  $\text{NH}_4^+$  o  $\text{H}^+$ , tanto en columna como en sistemas de agitación (Asano y col., 1994b; Kite y col., 1999). En función del grado de enriquecimiento o purificación deseado, los extractos pueden ser también sometidos a varios tratamientos consecutivos con diferentes resinas. Así, por ejemplo, se ha descrito el empleo de Amberlite IR-120 en forma  $\text{H}^+$ , seguido de Amberlite GC-50 en forma  $\text{NH}_4^+$ , de Dowex 50W-X8, de Dowex 1-X2 y, finalmente, de Amberlite GC120 para el aislamiento de DNJ en una única fracción a partir de extractos de hojas de morera (Asano y col., 1994a; Asano y col., 2001).

Sin embargo, la principal limitación del uso de resinas de intercambio iónico reside en el empleo generalmente de disolventes de grado no alimentario para la elución de las distintas fracciones. Es por ello que en la actualidad se estén investigando vías alternativas para la purificación de iminoazúcares como los tratamientos microbiológicos, que permiten la eliminación selectiva de los carbohidratos no deseados con excelentes resultados (Rodríguez-Sánchez, 2011).

### 3. ANÁLISIS

#### 3.1. Cromatografía de gases (GC)

La semejanza estructural de los iminoazúcares con los carbohidratos señala a la GC, con detectores tales como de ionización de llama (GC-FID) o de espectrometría masas (GC-MS), como una de las técnicas más adecua-

das para su análisis. Como para los azúcares, es necesario llevar a cabo una derivatización previa, que les confiera la volatilidad y estabilidad necesarias para su análisis por GC. Sin embargo, el proceso de derivatización de iminoazúcares, al contrario que para los azúcares, no es trivial, al ser comunes las derivatizaciones parciales o poco reproducibles, problema que ha sido objeto de estudio por diferentes autores (Kite y col., 1997; Rodríguez-Sánchez y col., 2011). Mientras los grupos hidroxilo se derivatizan muy fácilmente, la reacción del grupo imino depende del agente derivatizante y de las condiciones de derivatización, pudiendo resultar así uno o dos picos cromatográficos para cada iminoazúcar.

Una dificultad añadida del análisis de iminoazúcares en matrices vegetales es la previamente mencionada presencia de, entre otras, mezclas complejas de carbohidratos y derivados, cuyas señales cromatográficas pueden interferir en la determinación de los compuestos de interés. Es por ello que el análisis de iminoazúcares requiera la selección de métodos de derivatización que supongan una simplificación del perfil cromatográfico, que generalmente viene dada por la reducción del número de señales para cada compuesto detectado, así como por la optimización de las condiciones de separación.

Uno de los procedimientos de derivatización más empleados es la formación de trimetilsilil derivados (TMS), que puede llevarse a cabo utilizando diferentes reactivos (trimetilsililimidazol (TMSI); trimetilclorosilano (TMCS); hexametildisilazano (HMDS); *N*-metil-*N*-(trimetilsilil) trifluoroacetamida (MSTFA); *N,O*-bis-(trimetilsilil)-trifluoroacetamida (BSTFA), etc. y condiciones de derivatización (Molyneux y col., 2002) (Tabla 1).

Troyano y col. (1991), en un estudio sobre la sililación de cetosas presentes en leche, observaron diferentes rendimientos de sililación y abundancia de señal correspondiente a la forma abierta del carbohidrato en función del agente sililante y condiciones de derivación empleadas. Así, el empleo de TMSI/TMCS dio lugar a rendimientos de sililación cercanos al 100% con porcentajes de forma abierta de la cetosa menores del 3%.

Molyneux y col. (1993) describieron el tratamiento con MSTFA en piridina durante 12 horas a 60°C como método de derivatización de calisteginas previo a su análisis por GC. Si bien dicho procedimiento permitió la derivatización tanto de los grupos hidroxilo como del grupo imino de estos polihidroxiacaloides, presenta como inconveniente la descomposición de algunas calisteginas debido a las enérgicas condiciones que implica

Tabla 1. Derivados de iminoazúcares para su análisis por GC.

DERIVADOS	REACTIVOS	REACCIÓN DE DERIVATIZACIÓN	VENTAJAS	INCONVENIENTES	REFERENCIAS
Trimetilsilil derivados	MSTFA/ TMS		<ul style="list-style-type: none"> <li>Derivados más volátiles, menos polares y más estables térmicamente que los acetil derivados.</li> <li>Método de derivatización rápido que transcurre bajo condiciones relativamente suaves.</li> <li>Para DNJ y fagomina, los derivados con BSTFA/TMCS conducen a un solo pico cromatográfico por iminoazúcar.</li> <li>Para DNJ, fagomina y ác. pipécólicas, los derivados formados con HMDS/TFA conducen a un solo pico cromatográfico por cada iminoazúcar.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cromatogramas complejos debido a las diferentes formas tautoméricas de los carbohidratos (hasta 5 señales por compuesto).</li> <li>Las muestras deben estar completamente secas.</li> <li>Para DNJ, fagomina y ác. pipécólicas, los derivados con MSTFA/TMCS conducen a dos picos cromatográficos.</li> <li>Para los ác. pipécólicas, los derivados con BSTFA/TMCS conducen a dos picos cromatográficos.</li> <li>La derivatización con TMS/TMCS no es reproducible para iminoazúcares tales como ác. pipécólicas.</li> </ul>	Troyano y col., 1991
	BSTFA/ TMCS				
	TMSI/ TMCS				
	HMDS/ TFA				
Trimetilsilil oximas	1)NH <sub>2</sub> OH HCl 2)HMDS/TFA		<ul style="list-style-type: none"> <li>Para DNJ y fagomina, estos derivados conducen a un solo pico cromatográfico por cada iminoazúcar.</li> <li>Reduce el número de picos cromatográficos a dos para carbohidratos reductores (números apr-(C) y apr-(E)) o uno para carbohidratos no reductores.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Las muestras deben estar completamente secas.</li> </ul>	Molyneux y col., 2002 Rodríguez-Sánchez y col., 2011
Acetil-derivados	(AcO) <sub>2</sub> O		<ul style="list-style-type: none"> <li>Los iminoazúcares dan un solo pico cromatográfico.</li> <li>Apropiados para el análisis de carbohidratos de bajo peso molecular.</li> <li>Derivados estables química y térmicamente.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cromatogramas complejos debido a las múltiples señales correspondientes a las diferentes formas tautoméricas de los carbohidratos.</li> <li>Baja volatilidad comparados con los trimetilsilil éteres.</li> </ul>	Magalhães y col., 2002
Aldononitrilos peracetilados	1)NH <sub>2</sub> OH HCl 2)(AcO) <sub>2</sub> O		<ul style="list-style-type: none"> <li>Los iminoazúcares dan un solo pico cromatográfico.</li> <li>Disminuye el número de picos cromatográficos a dos para carbohidratos reductores (números apr-(C) y apr-(E)) o uno para carbohidratos no reductores.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>La derivatización de las cetonas es poco reproducible.</li> </ul>	Rodríguez-Sánchez y col., 2011



este tratamiento. Alternativamente, el uso de HMDS/TMCS (10:1) en condiciones suaves (50°C durante 15 minutos), da lugar a la completa derivatización de todos los grupos hidroxilo sin afectar al grupo imino y evitando la degradación de las calisteginas (Dräger, 1995).

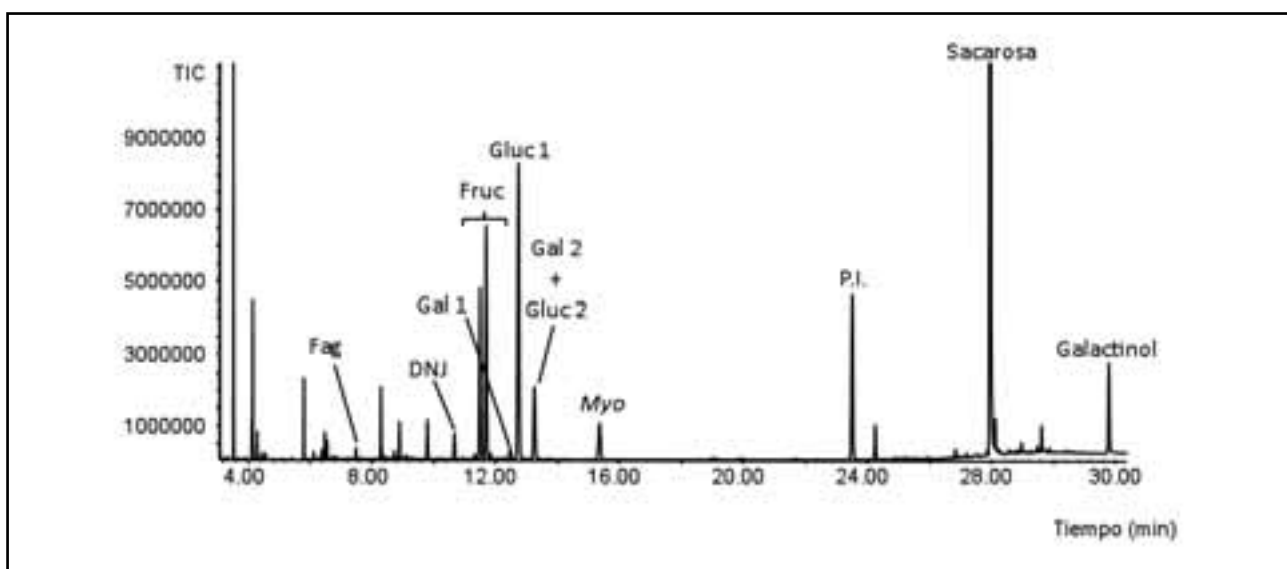
Por otra parte, Kite y col. (1997) realizaron un estudio de las condiciones necesarias para la derivatización tanto de los grupos hidroxilo, del grupo imino y de ambos de ácidos hidroxipiperídicos. Sin embargo, todos los agentes empleados daban proporciones variables de los derivados sililados de los grupos hidroxilo y del grupo imino.

En su aplicación a la derivatización de DNJ, Rodríguez-Sánchez y col. (2011) demostraron que, mientras el MSTFA/TMCS conducía a la formación de dos silil-derivados que diferían en la derivatización o no del grupo imino, otros reactivos tales como BSTFA/TMCS, HMDS/TFA (ácido trifluoroacético) y TMSI/TMCS daban lugar a un solo pico cromatográfico correspondiente al compuesto con el grupo imino sin derivatizar para el caso de DNJ y fagomina. Con el fin de solventar en la medida de lo posible los problemas de coelución asociados con el análisis de iminoazúcares en presencia de mezclas complejas de carbohidratos, recientemente Rodríguez-Sánchez y col. (2011) han sugerido la conversión a oximas de los carbohidratos reductores presentes en dichas mezclas previo a la sililación (TMSO; Tabla 1).

Dicho procedimiento, que da lugar a una única señal para iminoazúcares como DNJ o fagomina (todos los hidroxilos derivatizados), permite reducir también el número de señales correspondientes a los carbohidratos (2 picos para azúcares reductores y 1 para no reductores), facilitando así la resolución de azúcares e iminoazúcares (Figura 2).

Otro procedimiento alternativo para la derivatización de iminoazúcares, descrito por primera vez por Magalhães y col. (2002), consiste en la acetilación con anhídrido acético en piridina a 20°C durante 20 horas. Este tratamiento permitió la posterior caracterización/identificación por GC-MS basada en sus espectros de masas de cinco polihidroxicarbohidros acetilados, DNJ y fagomina entre ellos, en extractos de *Lonchocarpus sp.*

A pesar de que los iminoazúcares no forman oximas, se ha propuesto recientemente un paso previo a la acetilación de oximación para el análisis de dichos compuestos en presencia de carbohidratos. Por este procedimiento, las aldosas reductoras dan lugar a aldononitrilos peracetilados, mientras que las cetosas forman oximas acetiladas. Aunque no se observaron coeluciones entre iminoazúcares (DNJ y fagomina) y carbohidratos (ribosa, fructosa, galactosa y glucosa), este proceso de derivatización no resultó ser reproducible para las cetosas (Rodríguez-Sánchez y col., 2011).



**Figura 2.** Perfil cromatográfico de un extracto de hojas de morera (*Morus alba*) derivatizado a TMSO previo a su análisis por GC-MS: fagomina (Fag), DNJ, Galactosa (Gal), Fructosa (Fruc), Glucosa (Gluc), Myo-inositol (*Myo*), Fenil-β-D-glucósido (P.I.), Sacarosa y Galactinol.

### 3.2. Cromatografía de líquidos (HPLC)

La elevada hidrofilia y generalmente baja solubilidad de compuestos polares como los iminoazúcares en los disolventes orgánicos característicos de la cromatografía de líquidos en fase inversa (RP-HPLC), hacen limitado el número de referencias bibliográficas que tratan sobre su análisis por esta técnica. Otra dificultad añadida para su análisis, es la falta de grupos cromóforos o fluoróforos que permitan su detección óptica (absorción o fluorescencia). Estos problemas pueden solventarse mediante una derivatización pre- o postcolumna con un cromóforo o fluoróforo apropiado, lo cual aumenta la complejidad del análisis e implica una mayor manipulación de la muestra (Molyneux y col., 2002).

Existen algunos trabajos (Cole y col., 1988) en los que se ha empleado 9-fluorenilmetil cloroformato para la derivatización. Este compuesto reacciona con aminas primarias y secundarias en condiciones suaves, dando derivados fluorescentes estables. Sin embargo, en el caso de aminas terciarias, los derivados sufren desalquilación. Kim y col. (2003) proponen una modificación de este método para aminas primarias y secundarias que consiste en la reducción del pH previo al análisis por RP-HPLC para aumentar la estabilidad y vida media de estos derivados.

Otro modo de HPLC que ha resultado exitoso para el análisis de iminoazúcares es la cromatografía de interacción hidrofílica (HILIC), técnica ésta muy adecuada para el análisis de compuestos polares, y que por tanto puede resultar ventajosa en su aplicación al análisis de iminoazúcares en presencia de mezclas complejas de carbohidratos (Kimura y col., 2004). La capacidad de retención de la columna depende básicamente de la hidrofilia de los analitos, aunque otros mecanismos como puentes de hidrógeno, interacciones iónicas, etc. también pueden tener lugar dependiendo de la fase estacionaria elegida.

En la actualidad existen en el mercado diversas fases estacionarias para el análisis por HPLC en modo HILIC. Así, Tolstikov y col. (2002) emplearon una columna de polihidroxiethylamida para el análisis y separación de una mezcla de metabolitos de plantas, entre ellos un derivado metilado del DNJ (*N*-metil-1-desoxinojirimicina).

Una de las columnas más frecuentemente utilizadas son las basadas en grupos amida, que se han empleado satisfactoriamente para la determinación de DNJ en hojas de morera (Kimura y col., 2004). Asimismo, en este trabajo se empleó también por primera vez un detector de

dispersión de luz para el análisis de este tipo de alcaloides. Posteriormente se ha utilizado este sistema de detección para la determinación y cuantificación de DNJ, a partir de diferentes productos de grado alimentario procedentes de hojas de morera, obteniéndose muy buena sensibilidad (límite de detección entre 50-100  $\mu\text{g g}^{-1}$ ) (Kimura y col., 2007).

Algunos trabajos describen otras columnas HILIC para el análisis de iminoazúcares. En este sentido se ha descrito el análisis de polihidroxiacaloides en hojas de jacinto por Egan y col. (1999), así como también Guitton y col. (2009) describen el uso de una columna HILIC de sílice para la cuantificación rápida y sencilla de un fármaco derivado de DNJ (Miglustat) mediante LC-MS/MS.

Recientemente, se ha descrito un método por cromatografía de intercambio aniónico de alta eficacia con detección amperométrica de pulsos (HPAEC-PAD) para el análisis de DNJ en productos derivados de hojas de morera sin necesidad de derivatización previa (Yoshihashi y col., 2010). HPAEC-PAD presenta como principal ventaja en su aplicación al análisis de dichos compuestos el ser una técnica sensible y selectiva para grupos susceptibles de oxidarse, como es el caso de los grupos hidroxilo de los iminoazúcares.

La HPLC acoplada a espectrometría de masas (HPLC-MS), particularmente con ionización por electrospray (ESI) e ionización química a presión atmosférica (APCI), es también muy prometedora para el análisis de iminoazúcares sin derivatización previa. Así, se ha llevado a cabo el análisis de alcaloides tipo pirrolizidina en miel por HPLC-APCI-MS utilizando una columna  $\text{C}_8$  de fase inversa (Beales y col., 2004), y la separación e identificación de DNJ, fagomina y galactosil-DNJ mediante HILIC-MS (Nakagawa y col., 2007; 2010).

Se han aplicado también los acoplamientos de HPLC a sistemas de MS tándem (HPLC-MS<sup>n</sup>) para el análisis de iminoazúcares. Así, Kite y col., (1999) han empleado la espectrometría de masas tándem con ionización química a presión atmosférica (APCI-MS<sup>n</sup>) para la determinación del grado de hidroxilación de polihidroxiacaloides en diferentes extractos de plantas. Si bien, Nuengchamong y col. (2007) fueron los primeros en describir la aplicación de esta técnica en modo monitorización de reacciones múltiples para la identificación inequívoca de DNJ, posteriormente otros autores como Nakagawa y col. (2010) la han utilizado para el análisis de DNJ en morera.

### 3.3. Otras Técnicas

Además de las técnicas cromatográficas de alta resolución previamente mencionadas, se han utilizado también otras técnicas para el análisis de iminoazúcares tales como espectroscopía infrarroja (IR) (Koyama y col., 1974), espectroscopía de resonancia magnética nuclear de carbono 13 y de protón (<sup>13</sup>C-RMN y <sup>1</sup>H-RMN, respectivamente) (Asano y col., 1994b; Zhu y col., 2010), etc., principalmente para determinar sus estructuras químicas. Otras como la cromatografía líquida en capa fina de alta resolución (HPTLC) se han usado para comprobar la pureza de las muestras (Asano y col., 2005; Kato y col., 2008).

### 4. CONCLUSIONES

Como se pone de manifiesto en esta revisión, el análisis de iminoazúcares en muestras de origen vegetal no es trivial, ya que en este tipo de matrices dichos compuestos se encuentran formando parte de mezclas complejas que incluyen, entre otros, compuestos como los carbohidratos que pueden interferir en su bioactividad.

Si bien las metodologías convencionales generalmente empleadas para su extracción, y basadas en la extracción sólido-líquido, dan lugar a buenos rendimientos, la investigación sobre el uso de metodologías alternativas puede resultar ventajosa en cuanto a rapidez, consumo de disolvente, etc.

Con respecto al enriquecimiento o purificación de los iminoazúcares, la cromatografía de intercambio iónico suele ser la técnica de elección. Sin embargo, como se ha mencionado anteriormente, su aplicación en la industria alimentaria requiere la adecuación de las metodologías hasta el momento desarrolladas para su utilización con disolventes de grado alimentario. Alternativamente, el empleo de metodologías basadas en tratamientos microbiológicos que emplean únicamente agua ha dado lugar a excelentes resultados, siendo además procesos fácilmente escalables a nivel industrial.

En cuanto al análisis se refiere, los métodos por GC, aunque requieren la derivatización previa de la muestra, presentan ventajas en su acoplamiento a MS para la identificación de iminoazúcares. Los métodos por HPLC desarrollados hasta el momento se centran principalmente en la determinación de uno o unos pocos iminoazúcares presentes en mezclas complejas. De entre ellos, los basados en HPLC-MS requieren generalmente el trabajo en modo registro selectivo de iones (SIM), lo que dificulta la identificación/caracterización de los compuestos

detectados. En este sentido, sería de interés la búsqueda de metodologías alternativas que permitan el análisis simultáneo, tanto cuali- como cuantitativo, de estos compuestos por HPLC, así como de otros compuestos (interferentes o no) presentes en la muestra analizada.

### REFERENCIAS

- Afarinkia, K., & Bahar, A. (2005). Recent advances in the chemistry of azapyranose sugars. *Tetrahedron-Asymmetry*, *16*, 1239-1287.
- Asano, N., Oseki, K., Tomioka, E., Kizu, H., & Matsui, K. (1994a). N-Containing sugars from *Morus alba* and their glycosidase inhibitory activities. *Carbohydrate Research*, *259*, 243-255.
- Asano, N., Tomioka, E., Kizu, H., & Matsui, K. (1994b). Sugars with nitrogen in the ring isolated from the leaves of *Morus bombycis*. *Carbohydrate Research*, *253*, 235-245.
- Asano, N., Kato, A., Miyauchi, M., Kizu, H., Kameda, Y., Watson, A. A., Nash, R. J., & Fleet, G. W. J. (1998). Nitrogen-containing furanose and pyranose analogues from *Hyacinthus orientalis*. *Journal of Natural Products*, *61*, 625-628.
- Asano, N., Nash, R. J., Molyneux, R. J., & Fleet, G. W. J. (2000). Sugar-mimic glycosidase inhibitors: natural occurrence, biological activity and prospects for therapeutic application. *Tetrahedron-Asymmetry*, *11*, 1645-1680.
- Asano, N., Yamashita, T., Yasuda, K., Ikeda, K., Kizu, H., Kameda, Y., Kato, A., Nash, R. J., Lee, H. S., & Ryu, K. S. (2001). Polyhydroxylated alkaloids isolated from mulberry trees (*Morus alba* L.) and silkworms (*Bombyx mori* L.). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, *49*, 4208-4213.
- Asano, N., Yamauchi, T., Kagamifuchi, K., Shimizu, N., Takahashi, S., Takatsuka, H., Ikeda, K., Kizu, H., Chuakul, W., Kettawan, A., & Okamoto, T. (2005). Iminosugar-producing Thai medicinal plants. *Journal of Natural Products*, *68*, 1238-1242.
- Banba, Y., Abe, C., Nemoto, H., Kato, A., Adachi, I., & Takahata, H. (2001). Asymmetric synthesis of fagomine and its congeners. *Tetrahedron-Asymmetry*, *12*, 817-819.
- Beales, K. A., Betteridge, K., Colegate, S. M., & Edgar, J. A. (2004). Solid-phase extraction and LC-MS analysis of pyrrolizidine alkaloids in honeys. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, *52*, 6664-6672.
- Boyer, F. D., & Lallemand, J. Y. (1994). Enantioselective syntheses of polyhydroxylated nortropane derivatives. Total synthesis of (+)-calystegine B<sub>2</sub> and (-)-calystegine B<sub>2</sub>. *Tetrahedron*, *50*, 10443-10458.
- Brock, A., Bieri, S., Christen, P., & Drager, B. (2005). Calystegines in wild and cultivated *Erythroxylum* species. *Phytochemistry*, *66*, 1231-1240.

- Butt, M. S., Nazir, A., Sultan, M. T., & Schroen, K. (2008). *Morus alba* L. nature's functional tonic. *Trends in Food Science & Technology*, 19, 505-512.
- Clapés Saborit, P., Joglar, J., Castillo, J. A., & Lozano, C. (2010). Chemoenzymatic process for the preparation of iminocyclitols. In: Estados Unidos. US 2010/0009417 A1.
- Cole, M. D., Fellows, L. E., & Romeo, J. T. (1988). Separation of hydroxy and polyhydroxy derivatives of 2-carboxy and 2-hydroxymethyl piperidine and pyrrolidine by high-performance liquid-chromatography. *Journal of Chromatography*, 445, 295-298.
- Csuk, R., Prell, E., & Reissmann, S. (2008). Total synthesis of calystegine A(7). *Tetrahedron*, 64, 9417-9422.
- Dräger, B. (1995). Identification and quantification of calystegines, polyhydroxyl nortropane alkaloids. *Phytochemical Analysis*, 6, 31-37.
- Dräger, B. (2004). Chemistry and biology of calystegines. *Natural Product Reports*, 21, 211-223.
- Duclos, O., Dureault, A., & Depeyaz, J. C. (1992). Access to polyhydroxylated cycloheptane derivatives through stereoselective nitrile oxide intramolecular cycloaddition - synthesis of an analog of calystegine B<sub>2</sub>. *Tetrahedron Letters*, 33, 1059-1062.
- Egan, M. J., Porter, E. A., Kite, G. C., Simmonds, M. S. J., Barker, J., & Howells, S. (1999). High performance liquid chromatography quadrupole ion trap and gas chromatography mass spectrometry studies of polyhydroxyalkaloids in bluebells. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 13, 195-200.
- Ercisli, S., Orhan, E., & Esitken, A. (2006). Genetic diversity in fruit quality traits in cornelian cherry (*Cornus mas* L.). *Asian Journal of Chemistry*, 18, 650-654.
- Evans, S. V., Fellows, L. E., Shing, T. K. M., & Fleet, G. W. J. (1985). Glycosidase inhibition by plant alkaloids which are structural analogs of monosaccharides. *Phytochemistry*, 24, 1953-1955.
- Fellows, L. E., Fleet, G. W. J. (1989). Natural products isolation. In R. c. G.H. Wagman (Ed.), *Separation methods for antimicrobials, antivirals and enzyme inhibitors* (pp. 539). Amsterdam: Elsevier.
- Fu, R., Du, Y., Li, Z. Y., Xu, W. X., & Huang, P. Q. (2009). Asymmetric syntheses of 6-deoxyfagomin, D-deoxyrhamnojirimycin, and D-rhamnono-1,5-lactam. *Tetrahedron*, 65, 9765-9771.
- Guitton, J., Coste, S., Guffon-Fouilhoux, N., Cohen, S., Manchond, M., & Guillaumont, M. (2009). Rapid quantification of miglustat in human plasma and cerebrospinal fluid by liquid chromatography coupled with tandem mass spectrometry. *Journal of Chromatography B-Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences*, 877, 149-154.
- Kato, A., Kato, N., Miyauchi, S., Minoshima, Y., Adachi, I., Ikeda, K., Asano, N., Watson, A. A., & Nash, R. J. (2008). Iminosugars from *Baphia nitida* Lodd. *Phytochemistry*, 69, 1261-1265.
- Kim, J. W., Kim, S. U., Lee, H. S., Kim, I., Ahn, M. Y., & Ryu, K. S. (2003). Determination of 1-deoxynojirimycin in *Morus alba* L. leaves by derivatization with 9-fluorenylmethyl chloroformate followed by reversed-phase high-performance liquid chromatography. *Journal of Chromatography A*, 1002, 93-99.
- Kimura, T., Nakagawa, K., Saito, Y., Yamagishi, K., Suzuki, M., Yamaki, K., Shinmoto, H., & Miyazawa, T. (2004). Determination of 1-deoxynojirimycin in mulberry leaves using hydrophilic interaction chromatography with evaporative light scattering detection. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 52, 1415-1418.
- Kimura, T., Nakagawa, K., Kubota, H., Kojima, Y., Goto, Y., Yamagishi, K., Oita, S., Oikawa, S., & Miyazawa, T. (2007). Food-grade mulberry powder enriched with 1-deoxynojirimycin suppresses the elevation of postprandial blood glucose in humans. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 55, 5869-5874.
- Kite, G. C., & Hughes, M. J. (1997). Analysis of hydroxypicolinic acids by gas chromatography mass spectrometry. *Phytochemical Analysis*, 8, 294-300.
- Kite, G. C., Porter, E. A., Egan, M. J., & Simmonds, M. S. J. (1999). Rapid detection of polyhydroxyalkaloid mono- and diglycosides in crude plant extracts by direct quadrupole ion trap mass spectrometry. *Phytochemical Analysis*, 10, 259-263.
- Koyama, M., & Sakamura, S. (1974). Structure of a new piperidine derivative from buckwheat seeds - *Fagopyrum esculentum* Moench. *Agricultural and Biological Chemistry*, 38, 1111-1112.
- Kvasnicka, F., Jockovic, N., Drager, B., Sevcik, R., Cepl, J., & Voldrich, M. (2008). Electrophoretic determination of calystegines A<sub>3</sub> and B<sub>2</sub> in potato. *Journal of Chromatography A*, 1181, 137-144.
- Magalhães, A. F., Santos, C. C., Magalhaes, E. G., & Nogueira, M. A. (2002). Detection of polyhydroxyalkaloids in *Lonchocarpus* extracts by GC-MS of acetylated derivatives. *Phytochemical Analysis*, 13, 215-221.
- Martin, O. R., & Compain, P. (2003). Iminosugars: Recent insights into their bioactivity and potential as therapeutic agents - Preface. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 3.
- Molyneux, R. J., Pan, Y. T., Goldmann, A., Tepfer, D. A., & Elbein, A. D. (1993). Calystegins, a novel class of alkaloid glycosidase inhibitors. *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 304, 81-88.
- Molyneux, R. J., Pan, Y. T., & Elbein, A. D. (1996). Polyhydroxy alkaloid glycosidase inhibitors from plants: Structure, distribution, and function. *Glycobiology*, 6, F5-F5.
- Molyneux, R. J., Gardner, D. R., James, L. F., & Colegate, S. M. (2002). Polyhydroxy alkaloids: chromatographic analysis. *Journal of Chromatography A*, 967, 57-74.
- Monrad, R. N., Pipper, C. B., & Madsen, R. (2009). Synthesis of calystegine A<sub>3</sub> from glucose by the use of Ring-Closing Metathesis. *European Journal of Organic Chemistry*, 3387-3395.

- Moosophon, P., Baird, M. C., Kanokmedhakul, S., & Pyne, S. G. (2010). Total Synthesis of Calystegine B<sub>4</sub>. *European Journal of Organic Chemistry*, 3337-3344.
- Nakagawa, K., Kubota, H., Kimura, T., Yamashita, S., Tsuzuki, T., Oikawa, S., & Miyazawa, T. (2007). Occurrence of orally administered mulberry 1-deoxynojirimycin in rat plasma. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 55, 8928-8933.
- Nakagawa, K., Ogawa, K., Higuchi, O., Kimura, T., Miyazawa, T., & Hori, M. (2010). Determination of iminosugars in mulberry leaves and silkworms using hydrophilic interaction chromatography-tandem mass spectrometry. *Analytical Biochemistry*, 404, 217-222.
- Nuengchamnong, N., Ingkaninan, K., Kaewruang, W., Wongareonwanakij, S., & Hongthongdaeng, B. (2007). Quantitative determination of 1-deoxynojirimycin in mulberry leaves using liquid chromatography-tandem mass spectrometry. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 44, 853-858.
- Oku, T., Yamada, M., Nakamura, M., Sadamori, N., & Nakamura, S. (2006). Inhibitory effects of extractives from leaves of *Morus alba* on human and rat small intestinal disaccharidase activity. *British Journal of Nutrition*, 95, 933-938.
- Paulsen, H., & Todt, K. (1967). Monosaccharide mit stickstoffhaltigem ring. 12. uber monosaccharide mit stickstoffhaltigem siebenring. *Chemische Berichte-Recueil*, 100, 512.
- Rodríguez Sánchez, S. (2011). Desarrollo de métodos de extracción y análisis para la obtención de extractos enriquecidos en iminoazúcares a partir de hojas de morera (*Morus* sp.). Diploma de Estudios Avanzados. Universidad Autónoma de Madrid.
- Rodríguez-Sánchez, S., Hernandez-Hernandez, O., Ruiz-Matute, A. I., & Sanz, M. L. (2011). A derivatization procedure for the simultaneous analysis of iminosugars and other low molecular weight carbohydrates by GC-MS in mulberry (*Morus* sp.). *Food Chemistry*, 126, 353-359.
- Ruiz-Matute, A. I., Hernández-Hernández, O., Rodríguez-Sánchez, S., Sanz, M. L., & Martínez-Castro, I. (2011). Derivatization of carbohydrates for GC and GC-MS analyses. *Journal of Chromatography B*, 879, 1226-1240.
- Schaller, C., Vogel, P., & Jager, V. (1998). Total syntheses of (+)- and (-)-1-deoxynojirimycin (1,5-dideoxy-1,5-imino-D- and L-glucitol) and of (+)- and (-)-1-deoxyidonojirimycin (1,5-dideoxy-1,5-imino-D- and L- iditol) via furoisoxazoline-3-aldehydes. *Carbohydrate Research*, 314, 25-35.
- Schimming, T., Tofern, B., Mann, P., Richer, A., Jenett-Siems, K., Drager, B., Asano, N., Gupta, M. P., Correa, M. D., & Eich, E. (1998). Distribution and taxonomic significance of calystegines in the convol vulaceae. *Phytochemistry*, 49, 1989-1995.
- Soulie, J., Faitg, T., Betzer, J. F., & Lallemand, J. Y. (1996). General access to polyhydroxylated nortropane derivatives through hetero Diels-Alder cycloaddition. 2. Synthesis of (+/-)calystegine B<sub>2</sub>. *Tetrahedron*, 52, 15137-15146.
- Taniguchi, S., Asano, N., Tomino, F., & Miwa, I. (1998). Potentiation of glucose-induced insulin secretion by fagomine, a pseudo-sugar isolated from mulberry leaves. *Hormone and Metabolic Research*, 30, 679-683.
- Tepfer, D., Goldmann, A., Pamboukdjian, N., Maille, M., Lepingle, A., Chevalier, D., Denarie, J., & Rosenberg, C. (1988). A plasmid of *Rhizobium meliloti* 41 encodes catabolism of 2 compounds from root exudate of *Calystegium sepium*. *Journal of Bacteriology*, 170, 1153-1161.
- Tolstikov, V. V., & Fiehn, O. (2002). Analysis of highly polar compounds of plant origin: Combination of hydrophilic interaction chromatography and electrospray ion trap mass spectrometry. *Analytical Biochemistry*, 301, 298-307.
- Troyano, E., Olano, A., Fernández-Díaz, M., Sanz, J., & Martínez-Castro, I. (1991). Gas chromatographic analysis of free monosaccharides in milk. *Chromatographia*, 32, 379-382.
- Watson, A. A., Fleet, G. W. J., Asano, N., Molyneux, R. J., & Nash, R. J. (2001). Polyhydroxylated alkaloids - natural occurrence and therapeutic applications. *Phytochemistry*, 56, 265-295.
- Yokoyama, H., Ejiri, H., Miyazawa, M., Yamaguchi, S., & Hirai, Y. (2007). Asymmetric synthesis of fagomine. *Tetrahedron-Asymmetry*, 18, 852-856.
- Yoshihashi, T., Do, H. T. T., Tungtrakul, P., Boonbumrung, S., & Yamaki, K. (2010). Simple, Selective, and Rapid Quantification of 1-Deoxynojirimycin in Mulberry Leaf Products by High-Performance Anion-Exchange Chromatography with Pulsed Amperometric Detection. *Journal of Food Science*, 75, C246-C250.
- Zhu, Y. P., Yamaki, K., Yoshihashi, T., Kameyama, M. O., Li, X. T., Cheng, Y. Q., Mori, Y., & Li, L. T. (2010). Purification and Identification of 1-Deoxynojirimycin (DNJ) in Okara Fermented by *Bacillus subtilis* B<sub>2</sub> from Chinese Traditional Food (Meitaoza). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 58, 4097-4103.

## XI REUNIÓN CIENTÍFICA DE LA SECyTA (40ª REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

La XI Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (XL Reunión del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines) se celebró en Barcelona dentro de las 13<sup>as</sup> Jornadas de Análisis Instrumental (JAI) en el Recinto Ferial Gran Vía, del 14 al 16 de Noviembre de 2011, en el marco de la 16ª edición de EXPOQUIMIA, escenario en esta ocasión de la clausura del Año Internacional de la Química. La Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA), así como la Sociedad de Espectroscopia Aplicada (SEA), la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM) y la Sociedad Española de Proteómica (SEProt), colaboró con la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA), en la ardua labor de la organización de estas Jornadas, que contaron con la participación de cerca de 500 asistentes, logrando un año más que hayan sido todo un éxito, además de fructíferas en muchos aspectos.

Bajo el hilo conductor de la instrumentación analítica, estas jornadas científicas constituyeron una vez más, una excelente ocasión para analizar aspectos como la calidad y seguridad alimentaria, el medio ambiente, la automatización y miniaturización en el análisis químico y la nanotecnología, los biosensores y la electroquímica, los análisis clínicos y de productos farmacéuticos o los análisis de proteínas, a través de un programa científico de alto nivel con la presencia de prestigiosos ponentes nacionales e internacionales.

En esta ocasión, entre los conferenciantes invitados a estas prestigiosas jornadas del sector químico español, se encontraron R. Graham Cooks, profesor de la Universidad de Purdue (EE.UU); Luis M. Liz-Marzán, profesor de la Universidad de Vigo (España); Richard M. Crooks, profesor de la Universidad de Texas en Austin (EE.UU); Jenny Ennéus, profesora de la Universidad de Dinamarca; Pier Giorgio Righetti, profesor de la Universidad de Milán (Italia); Joan Albaigés, profesor de investigación del CSIC en el Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua de Barcelona (España); Francisca Mulero, responsable de la unidad de imagen molecular en el Centro Nacional de Investigación del Cáncer, en Madrid (España); Cristina Nerín, profesora de la Universidad de Zaragoza (España); Manuel Fuentes, del Centro de Investigación del Cáncer, en Salamanca (España); y Jordi Segura, director del Instituto Municipal de Investigación Médica (IMIM) del Hospital del Mar de Barcelona (España).

El programa también incluyó más de 50 comunicaciones orales, más de 340 posters expuestos con 5 sesiones dedicadas a la discusión de algunos de los posters más interesantes, una mesa redonda sobre las alternativas de los jóvenes investigadores en cuanto a sus futuras carreras científicas, una sesión de docencia y otra dedicada al ámbito empresarial. Las mejores comunicaciones orales y tipo cartel presentadas en estas Jornadas fueron destacadas por la SECyTA, mediante los VII Premios José Antonio García Domínguez patrocinados por Bruker Chemical Analysis.

Igualmente, las Jornadas se acompañaron de una exposición instrumental por parte de las casas comerciales especializadas, donde se presentaron las últimas novedades y avances científicos en instrumentación analítica y modernas metodologías de ensayo utilizadas en Química y Bioquímica.

Coincidiendo con dichas Jornadas, tuvo lugar la XI Asamblea General de la SECyTA, en la que se celebraron las elecciones para la renovación de la Junta de Gobierno, y se otorgaron las becas y ayudas concedidas por la SECyTA para la participación de estudiantes y jóvenes investigadores, promoviendo su asistencia a este tipo de eventos. Seguidamente, tuvo lugar la Cena de Gala en las bodegas que Freixenet tiene en Sant Sadurní d'Anoia, durante la cual tuvo lugar el acto de homenaje de la SECyTA a Joan Albaigés, Emilio Gelpí, Manuela Juárez, Isabel Martínez-Castro y Luis Esteban, a los que se les concedió la medalla de Honor de la SECyTA como merecido reconocimiento a su trayectoria científica y contribución decisiva al desarrollo y aplicación de la Cromatografía y sus Técnicas Afines en España.

Por último, reafirmar la excelente ocasión que constituyen estas Jornadas para discutir e intercambiar información, ideas, opiniones y experiencias entre los distintos grupos de investigación españoles y extranjeros que trabajan en temas relacionados con la cromatografía y técnicas afines, contribuyendo de esta manera a la resolución de los problemas que actualmente plantean la ciencia y la tecnología y por tanto, al desarrollo de la Química Analítica moderna.

**Marina Díez Municio**  
*Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL, CSIC-UAM)*

## VII PREMIO JOSÉ ANTONIO GARCÍA DOMÍNGUEZ

En el marco de las 13<sup>as</sup> Jornadas de Análisis Instrumental celebrada en Barcelona del 14 al 16 de Noviembre de 2011 se otorgaron los premios José Antonio García Domínguez a las mejores comunicaciones orales y tipo cartel presentadas en dicha reunión. La VII edición de los premios han sido patrocinados por Bruker. El jurado encargado de fallar los premios correspondientes a las mejores comunicaciones orales estaba formado por Elena Ibáñez (Presidenta), Begoña Jiménez, Jordi Díaz, Ana Agüera, Francesc Ventura y Francisco Javier Santos, que tras debatir los méritos científicos de las presentaciones, tomó por unanimidad los siguientes acuerdos:

**1<sup>er</sup> Premio a la mejor Comunicación Oral (800 euros)**

Comunicación: CSA-OC03

Título: THE IMPLEMENTATION OF LC-MS/MS FOR THE OFFICIAL CONTROL OF LIPOPHILIC TOXINS IN SHELLFISH: SINGLE-LABORATORY VALIDATION UNDER FOUR CHROMATOGRAPHIC CONDITIONS.

Autores:

*M. García Altares, J. Diogène, P. de la Iglesia Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries (IRTA), Generalitat de Catalunya, Sant Carles de la Ràpita, Spain*

**2<sup>o</sup> Premio a la mejor Comunicación Oral (500 euros)**

Comunicación: OAI-OC03

Título: METABOLOMIC STUDY OF ALZHEIMER'S DISEASE

Autores:

*C. Ibáñez<sup>a</sup>, C. Simó<sup>a</sup>, P.J. Martín Álvarez<sup>a</sup>, Cedazo-Mínguez<sup>b</sup>, A. Cifuentes<sup>a</sup>*

*<sup>a</sup>Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research (CIAL), CSIC, Madrid, Spain.*

*<sup>b</sup>NVS Department, KI-Alzheimer's Disease Research Center, Karolinska Institute, Stockholm, Sweden*

En el caso de los premios a los mejores comunicaciones tipo cartel presentados en las 13as JAI, el jurado estaba constituido por: M<sup>a</sup> José González (Presidenta), Lourdes Cantón, Rafael Cela, Esteban Abad, M<sup>a</sup> Teresa Galceran y Yolanda Picó. Este jurado tomó por unanimidad los siguientes acuerdos:

**1<sup>er</sup> Premio al mejor Póster (500 euros)**

Comunicación: MAM-P58

Título: EVALUATION OF NEW CHIRAL CELLULOSE-BASED STATIONARY PHASES SEPAPAK-2 AND SEPAPAK-4 FOR THE ENANTIOMERIC SEPARATION OF PESTICIDES BY NANO-LC AND CEC.

Autores:

*V. Pérez Fernández<sup>a</sup>, E. Domínguez Vega<sup>a</sup>, B. Chankvetadze<sup>b</sup>, A.L. Crego<sup>a</sup>, M.A. García<sup>a</sup>, M.L. Marina<sup>a</sup>*

*<sup>a</sup>Department of Analytical Chemistry, University of Alcalá, Alcalá de Henares, Madrid, Spain.*

*<sup>b</sup>Institute of Physical and Analytical Chemistry, School of Exact and Natural Sciences, Tbilisi, Georgia*

**2<sup>o</sup> Premio al mejor Póster (300 euros)**

Comunicación: ACI-P05

Título: DEVELOPMENT AND VALIDATION OF A HYDROPHILIC CHROMATOGRAPHY-TANDEM MASS SPECTROMETRY METHOD WITH ON-LINE POLAR EXTRACTION FOR THE ANALYSIS OF URINARY NUCLEOSIDES. POTENTIAL APPLICATION IN CLINICAL DIAGNOSIS.

Autores:

*D. García Gómez, E. Rodríguez Gonzalo, R. Carabias Martínez*

*Department of Analytical Chemistry, University of Salamanca (Spain)*

La entrega de los premios tuvo lugar el 16 de Noviembre de 2011, durante la ceremonia de clausura de las 13as Jornadas de Análisis Instrumental.

**F. Javier Santos**  
*Secretario de la SECyTA*

## 1<sup>er</sup> Premio a la mejor Comunicación Oral (800 euros)

Comunicación: CSA-OC03

### **THE IMPLEMENTATION OF LC-MS/MS FOR THE OFFICIAL CONTROL OF LIPOPHILIC TOXINS IN SHELLFISH: SINGLE-LABORATORY VALIDATION UNDER FOUR CHROMATOGRAPHIC CONDITIONS**

*García-Altres, M., Diogène, J., de la Iglesia, P. IRTA, Carretera de Poble Nou, km 5.5, 43540 Sant Carles de la Ràpita, Spain*

The accumulation of lipophilic marine toxins in shellfish poses a risk for human health and may lead to remarkable economic losses. The official control method for lipophilic toxins in bivalve mollusc is the method based on LC-MS/MS validated under the coordination of the European Union Reference Laboratory for Marine Biotoxins (EU-RL-MB) according to the Regulation (EC) 15/2011<sup>1</sup>. This method can be implemented using different chromatographic conditions<sup>2</sup> (i.e. different pH and buffer systems) in order to enable the analyst to choose the optimal set of conditions for their laboratories. Nevertheless, selectivity of chromatographic separations, ionization yields at the electrospray ionization source (ESI) and matrix effects are affected by pH and buffer systems in the mobile phase. Therefore, a comprehensive study has to be carried out before the selection of the chromatographic conditions to implement.

This study assesses applicability and suitability of four chromatographic conditions (acidic conditions with formate buffer<sup>3</sup>, alkaline conditions with ammonia<sup>4</sup>, close to neutrality conditions with ammonium acetate<sup>5</sup> and slightly basic conditions with ammonium bicarbonate as buffers<sup>6</sup>) for the separation and quantitation of six groups of lipophilic toxins (okadaic acid and dinophysistoxins, pectenotoxins, azaspiracids, yessotoxins, gymnodimine and spirolides) by LC-MS/MS. For every case, the chromatographic gradient has been optimized to achieve a total runtime cycle of ca. 12 min. Finally, the single laboratory validation has been performed for the analysis of three relevant matrices for the aquaculture industry (mussels, pacific oysters and clams), and for sea urchins for which no data about lipophilic toxins were reported before; spiked at three concentrations: 80 µg/kg, 160 µg/kg and 240 µg/kg for all toxins but yessotoxins, which were spiked at 250 µg/kg and 500 µg/kg. Alkaline conditions are the only scenario that

allows detection windows with polarity switching in a QTrap 3200 mass analyzer, thus the analysis of all groups of toxins tested can be done in the same run, reducing analysis time. All conditions satisfied the requirements for selectivity and linearity parameters. The limits of quantification of alkaline conditions meet the validation requirements posed by the EU-RL-MB for all toxins and matrices, while the rest of conditions failed in some cases. The precision of the method was acceptable under alkaline conditions for all toxins, matrices and concentrations; whereas the rest of conditions had precision problems, especially at low concentrations. The recovery of marine toxins was satisfactory for mainly all toxins, matrices and concentrations under alkaline conditions, but show overestimation of okadaic acid, which was corrected by matrix match standard calibration. The rest of conditions had unacceptable recoveries in several cases. According to these results, alkaline conditions were selected as the most adequate conditions for lipophilic marine toxins determination in bivalve mussels in the context of our laboratory. This comparative study can help other laboratories to choose the best conditions for the implementation of LC-MS/MS according to their own necessities.

<sup>1</sup> European Commission. COMMISSION REGULATION of 10 January 2011 amending Regulation (EC) No 2074/2005 as regards recognised testing methods for detecting marine biotoxins in live bivalve molluscs. Off. J.Europ. Union (L 6/3), 2011.

<sup>2</sup> EU-Harmonised Standard Operating Procedure for determination of Lipophilic marine biotoxins in molluscs by LC-MS/MS. Version 3. European Union Reference Laboratory for Marine Biotoxins, May 2011.

<sup>3</sup> P. McNabb, A. I. Selwood, and P. T. Holland. Journal of AOAC International, 88(3):761-772, 2005.

<sup>4</sup> A. Gerssen, P. P. J. Mulder, M. A. McElhinney, and J. de Boer. Journal of Chromatography A, 1216(9):1421-1430, 2009.

<sup>5</sup> L. A. Stobo, J. P. C. L. Lacaze, A. C. Scott, S. Gallacher, E. A. Smith, and M. A. Quilliam. Journal of AOAC International, 88(5):1371-1382, 2005.

<sup>6</sup> A. These, J. Scholz, and A. Preiss-Weigert. Journal of Chromatography A, 1216(21):4529-4538, 2009.



**2º Premio a la mejor Comunicación Oral (500 euros)**

Comunicación: OAI-OC03

**METABOLOMIC STUDY OF ALZHEIMER'S DISEASE***Clara Ibáñez<sup>a</sup>, Carolina Simó<sup>a</sup>, Pedro. J Martín Álvarez<sup>a</sup>, Angel Cedazo-Minguez<sup>b</sup>, Alejandro Cifuentes<sup>a</sup>**<sup>a</sup>Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research (CIAL), CSIC,**Nicolás Cabrera 9, 28049 Madrid, Spain.**<sup>b</sup>NVS Department, KI-Alzheimer's Disease Research Center, Karolinska Institute, 14186 Stockholm, Sweden*

In this work, a metabolomic study of more than 80 human cerebrospinal fluid (CSF) samples related to different Alzheimer's disease (AD) stages was carried out using capillary electrophoresis-mass spectrometry (CE-MS). CSF was obtained from healthy subjects, subjects showing a mild cognitive impairment (MCI) who remained stable, subjects showing a MCI that progressed to AD and subjects diagnosed with AD.

The CE-MS coupling was performed via an electrospray sheath-liquid interface (ESI) using a time of flight (TOF) MS analyzer. Due to the high speed and high mass resolution of the TOF analyzer, it is well-suited for on-line coupling with fast separation techniques like CE. Namely, TOF MS provided high mass resolution and high mass accuracy with mass determination errors below 5-10 ppm. CSF was analyzed after deproteinization by ultrafiltration using a membrane pore size of 3 µm. The ultrafiltrate was directly injected into the CE-MS. For the metabolic profiling of human CSF by CE-ESI-TOF MS, an acidic volatile buffer was used together with a bare fused-silica capillary. A metabolic profile in the positive ionization mode was obtained in less than 15 min. After discarding the potential interferences from solvent ions, adducts and others, more than 70 peaks were subjected to peak identification. Accurate mass provided by TOF MS allowed tentative identification of the majority of metabolites through the comparison of the obtained accurate m/z values and those contained in different open-source available databases (HMDB, KEGG, Metlin, etc.).

From our knowledge, this is the first time that CE-MS has been used to carry out a metabolomic study of AD. Results obtained in this work permitted to correctly classify all the samples into the four groups (corresponding to different AD stages) by the development of a statistical classification method. These

results demonstrated that CE-MS is a powerful analytical platform that may help improving the actual diagnosis, patient evolution monitoring, and discovery of new biomarkers related to different stages of AD.

**1º Premio al mejor Póster (500 euros)**

Comunicación: MAM-P58

**EVALUATION OF NEW CHIRAL CELLULOSE-BASED STATIONARY PHASES SEPAPAK-2 AND SEPAPAK-4 FOR THE ENANTIOMERIC SEPARATION OF PESTICIDES BY NANO-LC AND CEC***V. Pérez-Fernández<sup>a</sup>, E. Dominguez-Vega<sup>a</sup>, A. L. Crego<sup>a</sup>, B. Chankvetadze<sup>b</sup>, ,**M.A. García<sup>a</sup>, M.L. Marina<sup>a</sup>**<sup>a</sup>Department of Analytical Chemistry, University of Alcalá, Alcalá de Henares, Madrid, Spain.**<sup>b</sup>Institute of Physical and Analytical Chemistry, School of Exact and Natural Sciences, Tbilisi, Georgia.*

Capillary electrochromatography (CEC) and nano-liquid chromatography (nano-LC) with packed columns have been considered very promising techniques for chiral separations but the lack of commercial chiral stationary phases is the main drawback of these techniques. Thus, the preparation of efficient stationary phases for LC and CEC chiral separations is required. In this sense, the use of polysaccharide derivatives as chiral stationary phases offers the advantage of availability and the easy derivatization of the hydroxyl group. This leads to many different derivatives able to resolve enantiomerically a large number of compounds.

In this work, two novel polysaccharide-based chiral stationary phases, known as Sepapak-2 (cellulose tris(3-chloro-4-methylphenylcarbamate)) and Sepapak-4 (cellulose tris(4-chloro-3-methylphenyl carbamate)), have been evaluated for the chiral separation of a group of 16 pesticides including herbicides, insecticides, and fungicides. In order to achieve the enantiomeric separation of as many compounds as possible, the mobile phase composition was first optimized both in normal and reverse modes in nano-LC. Each chiral stationary phase gave optimal results under different separation conditions reaching the chiral separation of seven pesticides in Sepapak-2 and the chiral separation of nine compounds in Sepapak-4. Due to the fact that Sepapak-4 gave better results, this column was selected to compare nano-LC and CEC under the same conditions that consisted of a BGE composed of AcN/H<sub>2</sub>O/ammonium

formate (pH 2.5) 90/9/1 v/v/v. As expected, the efficiency in CEC experiments was higher than in nano-LC experiments for all the analyzed compounds and for some of them the efficiency was even five times higher. Moreover, the resolution values, that ranged from 0.8 to 6.4, were also higher in CEC experiments.

The CEC developed method was applied to the determination of enantiomeric impurities in commercial fungicide products marketed as enantiomerically pure (Metalaxyl-M) and for the analysis of tap water samples previous extraction by SPE using different extraction cartridges.

#### Acknowledgments

Financial support from the Spanish Ministry of Science and Innovation (project CTQ2009-09022) and the Comunidad Autónoma of Madrid (Spain) and european funding from FEDER program (project S2009/AGR-1464, ANALISYC-II) is gratefully acknowledged.

#### 2<sup>o</sup> Premio al mejor Póster (300 euros)

Comunicación: ACI-P05

#### **DEVELOPMENT AND VALIDATION OF A HYDROPHILIC CHROMATOGRAPHY – TANDEM MASS SPECTROMETRY METHOD WITH ON-LINE POLAR EXTRACTION FOR THE ANALYSIS OF URINARY NUCLEOSIDES. POTENTIAL APPLICATION IN CLINICAL DIAGNOSIS**

*D. García-Gómez (dgg@usal.es), E. Rodríguez-Gonzalo, R. Carabias-Martínez*

*Department of Analytical Chemistry, University of Salamanca, Plaza de los Caídos s/n 37008, Salamanca, Spain. Phone and fax number: 923294483*

During RNA turnover, the action of hydrolytic enzymes releases normal and modified nucleosides, a process that is enhanced in the presence of a tumor. Different studies have addressed the potential of these nucleosides as early markers for cancer diagnosis.

Different analytical techniques have been reported for the determination of nucleosides, being reverse phase liquid chromatography (RPLC) the most widely employed. However, the analysis of nucleosides involves important difficulties in RPLC owing to the poor retention in the stationary phase. Zwitterionic hydrophilic chromatography (ZIC-HILIC) has been proved

to be a viable alternative to RPLC for the separation of such polar compounds.

In the light of the above, we have developed a procedure for extraction and clean up of nucleosides from urine based on solid phase extraction (SPE) with a restricted access material (RAM) of polar nature (N-vinylacetamide copolymer) that can be applied for a wide kind of nucleosides. In most of the reported methods, nucleosides were isolated from urine by SPE in affinity mode by using an immobilized phenylboronic acid group, which specifically binds cis-diols. However, this is not applicable to the non-cis-diol nucleosides or nucleobases as in the case of 8-hydroxy-2'-deoxyguanosine, 7-methyl-guanine and guanine. However, the on-line coupling of the polar restricted access material and the ZIC-HILIC column is the main problem to be solved; this is because of the requirement that the solvent used in the elution step must be compatible with the chromatographic separation media used for the further separation. It must be shown that, in most of the on-line SPE-LC systems proposed in the literature, LC in reverse-phase has been used for the separation of analytes eluted from SPE sorbents; other modes of LC, such as HILIC, have been little used because the solvents required for sorbent elution may not be compatible with the mobile phase employed. To our knowledge, this is the first approach that proposed an on-line coupling of a RAM of polar nature to a ZIC-HILIC column. Thus, the main goal of this work was to develop a fast and reliable method based on ZIC-HILIC coupled to tandem mass spectrometry (ZIC-HILIC-MS/MS) for the separation, identification and quantification of modified nucleosides in human urine, that could be easily used as control method for clinical purposes such as early diagnosis for cancer and other diseases, and also for monitoring the progress of disease and the response to the therapy. This target has been tackled in two ways: (i) development of a simple on-line treatment for analyte isolation and matrix removal based on a solid-phase extraction step with a RAM device of polar nature (MSpak) coupled to the ZIC-HILIC column; and (ii) validation of the fully-automated method, MSpak-ZIC-HILIC-MS/MS, according to current legislation for bioanalytical methods.

The method was successfully applied to the analysis of urine samples of cancer patients. These samples presented an increased level of nucleosides that urine control samples. The application of pattern recognition methods, as PCA, HCA and SIMCA, allowed the correct clustering of the samples studied being 8OHG, URN and 7mG the nucleosides which presented the higher discriminant power.

## HOMENAJE A VARIOS SOCIOS

*El pasado 15 de noviembre de 2011, durante la cena de gala celebrada en las bodegas propiedad de Freixenet en Sant Sadurní d'Anoia, se rindió un merecido homenaje a diversos socios en reconocimiento a sus brillantes trayectorias profesionales, recibiendo la Medalla de Honor de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines. La labor desarrollada por estos investigadores ha contribuido extraordinariamente al desarrollo experimentado por las técnicas cromatográficas y de espectrometría de masas en España durante las últimas décadas. Los homenajeados, junto con un breve resumen de sus carreras profesionales, se detallan a continuación.*

### Joan Albaigés Riera



Profesor de Investigación del CSIC. En 1970 estableció, en Barcelona, el Departamento de Química Ambiental. Pionero en el desarrollo de las aplicaciones, de la cromatografía en estudios ambientales. Ha publicado más de 250 trabajos en revistas internacionales. 60 de ellos en revistas de cromatografía, y ha dirigido de 20 Tesis Doctorales. Editor de la Revista Int. J. Environ. Anal. Chem. Ha llevado a cabo una extensa actividad internacional como Asesor y colaborador de la UNEP, para el establecimiento de programas de vigilancia ambiental en países de América Latina. En 2002 fue nombrado vice-presidente del Comité Científico Asesor sobre el accidente del Prestige. Ha ocupado diversos cargos de responsabilidad en la gestión pública de la investigación (Director del Centro de Investigación y Desarrollo, Delegado del CSIC en Cataluña y Director General de Investigación) y de la política universitaria (Comisionado para Universidades e Investigación de la Generalitat de Catalunya).

### Luis Ignacio Esteban Bermúdez



Fue un destacado impulsor de la Cromatografía y de la Cromatografía acoplada a la Espectrometría de Masas en España. Desde su actividad profesional en varias empresas de instrumentación científica como Konik o Thermo Fisher Scientific ha contribuido a la formación de numerosos profesionales en este campo. Es de destacar su libro: “La Espectrometría de Masa en Imágenes” que se convirtió en libro de cabecera de varias generaciones de cromatografistas españoles. Su gran conocimiento sobre la Espectrometría de Masas de Relaciones Isotópicas (IRMS) lo convierten en uno de los grandes expertos españoles en este campo.

### Emilio Gelpí Monteys



Empezó su carrera científica en 1964 en la Universidad de Houston donde se doctoró en Bioquímica Analítica. Durante ese tiempo realizó trabajos con columnas capilares de acero inoxidable de hasta 300 metros de longitud, así como su acoplamiento a espectrometría de masas. Trabajó en el programa

de análisis de muestras lunares en la Universidad de California en Berkeley. En 1971, de regreso a España, trabajó en el Instituto de Biología Fundamental en la Universidad Autónoma de Barcelona. En 1975 creó el Departamento de Neuroquímica en el CSIC. Fue presidente del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines de la Real Sociedad Española de Química periodo en el cual nuestra sociedad se internacionalizó considerablemente y pasó a organizar reuniones internacionales como por ejemplo el HPLC en Granada y a publicar los trabajos presentados en sus reuniones en el Journal of Chromatography A. Creó la Sociedad Española de Espectrometría de Masas que dio lugar a la organización del 15º International Mass Spectrometry Congress.

## Manuela Juárez Iglesias



Como miembro de la SECyTA desde los años 80, ha asistido a numerosas reuniones del GCTA y SECyTA, destacando su participación en varias conferencias plenarias relacionadas con el área de Ciencia y Tecnología de los Alimentos, y en particular en el análisis y caracterización de productos lácteos, campo en el que ha sido pionera a nivel internacional. Actualmente, sus trabajos se dirigen al estudio de la relación entre la fracción lipídica de la leche y sus posibles beneficios en la salud, todo ello estrechamente vinculado con el desarrollo de nuevas técnicas de separación de estos productos/compuestos. La Dra. Juárez ha recibido numerosos y prestigiosos premios científicos nacionales e internacionales y ha ocupado cargos institucionales como el de Vicepresidenta de Ciencia y Tecnología del CSIC, la de Gestora del Programa Nacional de Tecnología de Alimentos del Plan Nacional de I+D, Coordinadora del área de Tecnología de Alimentos de la ANEP y Directora de IMDEA Alimentación.

## Isabel Martínez Castro



Su carrera profesional se ha desarrollado en el CSIC, primero en el Instituto de Lipoquímica y desde 1980 en el Instituto de Química Orgánica General, y su investigación ha estado siempre relacionada con técnicas cromatográficas. Además de llevar a cabo estudios básicos sobre columnas capilares y fases estacionarias, su trabajo se ha centrado en la caracterización de mezclas complejas de lípidos, carbohidratos y compuestos volátiles en alimentos (productos lácteos, mieles) y plantas, sobre todo desarrollando métodos basados en GC-MS. Ha sido directora de nuestra revista "Cromatografía y Técnicas Afines" de 1983 a 2008. Con ella, el "Boletín Informativo" pasó a ser la revista actual, que al incluir noticias, convocatorias de actividades, novedades técnicas y artículos científicos, se convirtió en el medio fundamental de comunicación entre los miembros de nuestro grupo. En la actualidad, sigue colaborando con su experiencia y buen hacer característico en la redacción de la revista.

Por último, el Prof. Emilio Gelpí intervino en nombre de todos los homenajeados y agradeció la concesión de la Medalla de Honor con unas emotivas palabras que transcribimos a continuación.

*Palabras de aceptación de la Medalla de Honor de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines.*

*Emilio Gelpí Monteys, 15 de noviembre de 2011*

“Naturalmente mis primeras palabras no pueden ser otras que las de un sincero agradecimiento por esta importante distinción y no solo a nivel personal sino también de parte de los otros cuatro colegas también premiados a quienes hoy tengo el honor y la responsabilidad de representar. Un honor y una responsabilidad

que me abruma porque pienso que, cuanto mayor me hago, esto de la oratoria cada vez me sale peor, por lo que ahora mismo desearía desaparecer de la escena. Lástima que mi nieto “el gran mago de la familia” no está hoy aquí conmigo para ayudarme con sus artes de magia. Por ello no me toca más remedio que hacer honor al cometido que se me ha encargado.

En nuestra profesión siempre tratamos de explicar el “Por qué de las cosas” y en esta línea, he estado pensando en por qué nos encontramos hoy aquí los cinco recibiendo esta medalla de honor. En nosotros se juntan cinco trayectorias profesionales bastante o muy diversas y en áreas de trabajo que van desde la Geoquímica Orgánica, la tecnología y ciencia de la alimentación, la instrumentación analítica y la lipidómica hasta la biomedicina, lo cual complica cualquier intento de un discurso integrador. Pero por otro lado, también me he dado cuenta de que en todos nosotros confluyen denominadores comunes, relacionados con este premio, que sí puedo destacar.

En primer lugar, los cinco, con unos años de diferencia en más o en menos, somos parte de una generación que hemos vivido muy de cerca y prácticamente desde sus inicios, la espectacular evolución de la instrumentación analítica y muy especialmente me refiero a los avances exponenciales que en 45 años han experimentado las técnicas de la separación cromatográfica y las de identificación por espectrometría de masas. Creo que todos intuíamos al principio que las condiciones de nuestro trabajo experimental poco a poco irían mejorando y que se irían rompiendo y conquistando barreras tecnológicas... pero ¿alguno de nosotros, o si me apuráis de los aquí presentes, se hubiera atrevido a pronosticar en los años 60 los avances mayúsculos que estaban por venir en los campos de la cromatografía y la espectrometría de masas?

¿Quién de nosotros no recuerda aquellas primeras columnas de relleno para GC y las peculiares y divertidas técnicas de llenado que utilizábamos para prepararlas en el laboratorio, así como aquellas primeras columnas capilares para cromatografía de gases y su acoplamiento al espectrómetro de masas? Me decía Isabel que aquí se trabajaba con columnas de 25 metros aunque yo, como me encontraba haciendo mi doctorado en Houston y como en Texas todo es grande, trabajaba con columnas de hasta 310 metros de longitud y 0.7 mm de diámetro interno, enrolladas sobre si mismas en un bloque compacto. Ya os podéis

imaginar los apuros para cargar todo este peso en el interior de un horno cromatográfico.

Y... aquellas interminables separaciones cromatográficas de horas y más horas. Lo que hoy se puede hacer en segundos y de forma automatizada requería mucho tiempo y enormes dosis de paciencia. No he tenido acceso a las primeras publicaciones de los otros premiados pero revisando alguna de mis publicaciones he encontrado una de 1969 con una figura en la que el eje del tiempo de separación es de 23 horas y con ello he recordado que para no pasarme toda la noche delante del equipo de GC-MS (entonces no podías confiar en automatismos) enfriaba rápidamente la columna por la noche para continuar a la mañana siguiente con un rápido calentamiento.

En aquellos primeros y lejanos tiempos en los que nuestros esfuerzos se centraban en conseguir la separación y caracterización de todo tipo de compuestos químicos y biológicos, pasábamos tantas horas delante de nuestros instrumentos, mimándolos y cuidándolos para asegurar los resultados y de hecho nos identificábamos tanto con ellos que no me extraña que, como sucedió en la XVIII reunión del GCTA en Reus en 1989, la prensa comentase que “los cromatógrafos habían salido a pasear por la ciudad”.

También, los cinco hemos pasado por las épocas del conteo manual de los picos de un espectro de masas, obtenido sobre papel fotográfico, y todos tuvimos que aguantar en su día los caprichos y neuras del integrador analógico de picos. Luego, llegaron los ordenadores y el control y tratamiento informatizado de la instrumentación analítica y de sus resultados y... ya ni os cuento la velocidad a la que se sucedieron los avances.

En segundo lugar, otro de nuestros denominadores comunes y que a lo largo de estos más de 40 años, nos ha unido a todos nosotros en una misma tarea ha sido nuestro decidido impulso y trabajo en pro del uso y divulgación de la cromatografía y de una técnica especialmente afín como es la espectrometría de masas. Todos hemos usado y divulgado, a través de nuestras múltiples y diversas publicaciones, las diferentes técnicas cromatográficas y de espectrometría de masas.

También, desde que en el año 1973 se constituyó la primera Junta Directiva del GCTA hasta la fecha, algunos de los galardonados que hoy recogemos esta

medalla de honor hemos participado con más o menos intensidad en alguna o en todas y cada una de las diferentes etapas de la creación, gestión, consolidación, divulgación e internacionalización del GCTA, hoy SECyTA.

Buceando en la hemeroteca digital de la WEB de la Sociedad he podido comprobar que el volumen 0 del primer boletín del GCTA salió en Julio de 1973 con una lista inicial de 111 socios, entre ellos J. Albaigés y yo. A continuación, en Enero de 1974 se produjeron las altas de Manuela Juárez y Luis Esteban y poco después la de Isabel.

Precisamente hablando del boletín, quien haya estado directamente ligado a la Sociedad a través de sus Juntas Directivas sabe perfectamente que Isabel Martínez Castro fue desde 1983 y durante años la responsable y alma del Boletín del grupo. Creo que Isabel merece una mención especial y el respeto y agradecimiento de todos nosotros por su dedicación y profesionalidad en esta tarea. Esta publicación ha sido y continúa siendo un órgano de comunicación y divulgación entre los científicos españoles interesados en las ciencias de la separación y de indudable valor para vincularnos a todos en la tarea común de conseguir que la SECyTA sea una institución útil para todos sus socios.

En cuanto a divulgación e internacionalización del grupo, en Expoquimia 75 (marzo 1975) la reunión anual del GCTA tuvo lugar en el marco de las primeras JAI. Estamos hablando de hace 40 años. En aquellos años los cromatografistas españoles no nos dábamos a conocer tanto como ahora fuera de nuestra fronteras. Así, mientras todos cultivábamos el dominio nacional, Joan Albaigés y yo mismo intentábamos estar además presentes en la mayoría de foros internacionales, como puede comprobarse a través de las reseñas de los trabajos y ponencias que presentábamos en congresos y que

se hallan recogidas en los primeros boletines. Creo que ambos teníamos claro que el futuro del GCTA pasaba por el mundo entero, además de por España.

En este sentido me enorgullece poder afirmar que cuando yo me hice cargo de la Presidencia del GCTA por dos mandatos en el periodo 1988-1996 y con la ayuda de toda la Junta Directiva y muy especialmente de nuestro presidente o ya expresidente, Joan Grimalt, nuestras reuniones anuales dejaron de ser simplemente reuniones nacionales para traspasar fronteras y promover por ejemplo la publicación de varios números especiales del Journal of Chromatography dedicados a las reuniones científicas del Grupo de Cromatografía. Finalmente, espero no haberos aburrido mucho y... terminaré con unas palabras de Joan Albaigés, con las que me identifiqué plenamente. El progreso técnico-científico es fruto de los esfuerzos y del trabajo de mucha gente. Por ello, todos agradecemos el honor que hoy se nos otorga y nos gustaría poder compartir dicho honor con todos aquellos con quienes hemos colaborado a lo largo del tiempo.

Y ahora, a título personal, y puesto que estas serán mis últimas JAI y Expoquimia y como, aunque el proceso de renovación generacional por personal más joven está claramente en marcha, aun veo muchas caras conocidas en este acto, aprovecho para despedirme. En unos meses se producirá mi desconexión del entorno laboral del CSIC. Ha sido un placer haber compartido todos estos años de apasionantes avances tecnológicos y científicos con todos vosotros y también quiero agradecer a mi familia más directa, mi esposa, mis hijos (nueras, no; hijas políticas, no) hijas el que hayan querido y podido acompañarme hoy en este adiós.

Muchas gracias y como siempre quedo a vuestra disposición.”



## Una nueva era en Cromatografía de Gases / Masas

### **Bruker SCION SQ™**

Robustez y eficacia combinadas en un Simple Cuadrupolo de altas prestaciones.



### **Bruker SCION TQ™**

Diseñado para dar la máxima prestaciones con alta fiabilidad, el detector Triple Cuadrupolo definitivo para los cromatografistas.



Consiga más información sobre cómo mejorar la productividad y las capacidades de su laboratorio incorporando un SCION GC-MS.

Visite [www.scionhasarrived.com](http://www.scionhasarrived.com) para más información, y busque su presentación más cercana.

Email: [info-bcad-spain@bruker.com](mailto:info-bcad-spain@bruker.com)

## 11ª ASAMBLEA GENERAL DE LA SECyTA (XL REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

La 11ª Asamblea General de la SECyTA, que contó con la asistencia de 88 Socios, se celebró el día 15 de Noviembre de 2011, a las 18:00 h en segunda convocatoria, en el Recinto Gran Vía de Fira de Barcelona (Av. Joan Carles I, 64. L'Hospitalet de Llobregat, Barcelona), Sala 4.2 del Centro de Convenciones CC4, con el siguiente Orden del Día:

- 1) Lectura y aprobación, si procede, del Acta de la Reunión anterior.
- 2) Informe del Presidente.
- 3) Informe del Secretario.
- 4) Informe de la Tesorera.
- 5) Próximos Congresos.
- 6) Elecciones a la Junta de Gobierno.
- 7) Ruegos y preguntas.

### Desarrollo de la Sesión y Acuerdos Adoptados

Una vez que el Presidente da la bienvenida a todos los Socios asistentes, la Asamblea se inicia adelantando el punto 6º del Orden del Día, Elecciones a la Junta de Gobierno, de forma que se pueda realizar la votación durante el transcurso de la Asamblea. Los miembros de la Junta de Gobierno que cesan en sus cargos de acuerdo con los Estatutos de la Asociación son:

Presidente: Joan Grimalt Obrador  
 Vicepresidenta: Elena Ibáñez Ezequiel  
 Secretario: Francisco Javier Santos Vicente  
 Vocal: Rosa Maria Marcé Recasens  
 Lourdes Ramos Rivero  
 José Mª Sangenís  
 Mercedes Torre Roldán  
 Francesc Ventura Amat

Así mismo, cesan en su cargo después de presentar su renuncia los siguientes miembros de la Junta de Gobierno:

Tesorera: Begoña Jiménez Luque  
 Vocal: Jordi Díaz Ferrero

Por indicación del Presidente, el Secretario informa a los asistentes de los cargos que serán elegidos para la renovación de la Junta de Gobierno de la SECyTA y que corresponden a: un Presidente, un Vicepresidente, un Secretario, un Tesorero y siete vocales.

Transcurrido los plazos establecidos, los miembros de la SECyTA que han presentado su candidatura a estas elecciones 2011 son los siguientes:

Presidenta: María José González Carlos  
 (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)

Vicepresidenta: Elena Ibáñez Ezequiel  
 (Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, CIAL- CSIC, Madrid)

Secretaria: Belén Gómara Moreno  
 (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)

Tesorero: Jordi Díaz Ferrero  
 (Instituto Químico de Sarriá, Universitat Ramon Llull, Barcelona)

Vocales: Joan Grimalt Obrador  
 (Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua, IDAEA- CSIC, Barcelona)

Begoña Jiménez Luque  
 (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)

José Monge Cónsul  
 (Agilent Technologies Spain, S.L., Barcelona)

José María Sangenís  
 (Thermo Fisher Scientific, Barcelona)

Fco. Javier Santos Vicente  
 (Universidad de Barcelona, Barcelona)

María Luz Sanz Murias  
 (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)

Juan Solé Ribalta  
 (HiTC, S.A., Barcelona)

La Junta de Gobierno avala todas las candidaturas presentadas.

Una vez comunicado a los asistentes los candidatos presentados, se procede a la constitución de la Mesa Electoral, de acuerdo con la normativa de elecciones aprobada en Junta de Gobierno de 5 de julio de 2007, y que establece que la Mesa estará formada por el socio



más antiguo y el más moderno que se encuentre presente en la Asamblea. La Mesa Electoral quedó constituida por el Dr. José Carlos Díez-Masa (nº socio 23) y el Sr. Cayo Corcellas Carramiñana (Nº socio 1633), quienes se encargaron de presidir la votación. Así mismo, el Secretario entrega a la Mesa Electoral el Censo de Socios, el Acta de votación y los votos recibidos por correo y/o entregados personalmente al Secretario (19 votos), de acuerdo con la normativa establecida en la convocatoria de elecciones. Con el fin de no alargar innecesariamente la Asamblea, se tratan el resto de puntos del Orden del día mientras se procede a la votación de los asistentes.

### **1. Lectura y aprobación del Acta de la Reunión anterior.**

El Acta de la 10ª Asamblea General de la SECyTA, celebrada en Valencia el 13 de Septiembre de 2010, se aprueba por unanimidad, sin correcciones.

### **2. Informe del Presidente.**

El Presidente da la bienvenida a todos los asistentes a la Asamblea General e inicia su informe con diversos temas relativos a la celebración y organización de las 13ªs Jornadas de Análisis Instrumental (13ªs JAI) y el cierre del 28º Internacional Symposium on Chromatography (ISC2010).

#### *2.1. 13ªs Jornadas de Análisis Instrumental (13ªs JAI).*

En esta edición de las JAI, la responsabilidad máxima de estas Jornadas recae en la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA), que ha liderado y gestionado los aspectos científicos y de organización de las Jornadas. La SECyTA ha colaborado en todos aquellos temas en que la SEQA ha solicitado su ayuda y ha consensuado con ella diversos aspectos del contenido del programa científico, la gestión de becas y otros temas de organización de las Jornadas. En la próxima edición de las JAI (14ªs JAI), que tendrá lugar en 2014, la responsabilidad recaerá en la SECyTA, como ocurrió anteriormente en el año 2008 con las 12ªs JAI.

#### *2.2. Cierre del 28º Internacional Symposium on Chromatography (ISC2010).*

El Presidente informa del cierre del congreso internacional ISC-2010, que se celebró en Valencia del 12 al 16 de Septiembre de 2010. La valoración de la

Reunión ha sido muy positiva, tanto desde un punto de vista de participación, más de 550 asistentes, como por el excelente nivel científico de las comunicaciones presentadas. También es importante destacar la atractiva exposición comercial y el elevado número de casas comerciales que participaron (22 en total). Por otro lado, el Palacio de Congresos de Valencia, sede del congreso, proporcionó un marco excelente para la celebración del ISC 2010, tanto desde un punto de vista del funcionamiento de las infraestructuras como por la profesionalidad de su personal.

En relación con la repercusión del congreso, el Presidente informa de la buena acogida que tuvo el ISC-2010 a nivel internacional y de la satisfacción del Comité del ISC por la excelente organización y desarrollo del mismo. Durante el transcurso del congreso tuvo lugar una reunión del Comité directivo del ISC, presidido por la Dra. Henion, en donde se decidió que el 29º ISC se celebre en Torun (Polonia), del 9 al 13 de Septiembre de 2012, presidido por el Dr. Boguslaw Buszewski, Presidente de la *European Society for Separation Science*, EuSSS.

#### *2.3. Año Internacional de la Química - 2011.*

En relación con la celebración en 2011 del Año Internacional de la Química, el Presidente informa a los asistentes que se está elaborando un documento con artículos de divulgación dedicados a promover y destacar el papel de la Cromatografía y sus Técnicas Afines en la resolución de problemas reales que afectan a la calidad de vida y el bienestar de la Sociedad. Pese a los momentos de crisis en que vivimos, la Industria Química ha sabido recuperar el importante papel económico que representa para el país y todo ello gracias, entre otros, al esfuerzo del mundo de la Universidad y de los Centros de investigación. En este contexto, la Química Analítica y, en particular, la Cromatografía siguen manteniendo un importante peso específico en el desarrollo y avance de la Química en España.

#### *2.4. Acto de Homenaje a Socios destacados de la SECyTA.*

El Presidente informa del Acto de Homenaje que se dará a destacados socios de la SECyTA, que por su valiosa contribución al desarrollo de la Cromatografía y Técnicas Afines en España y su brillante trayectoria científica en el campo de las Técnicas de Separación,

han jugado un papel relevante. El Acto de homenaje se realizará durante la cena de Gala de las 13<sup>as</sup> Jornadas de Análisis Instrumental el día 15 de Noviembre de 2011 en las Cavas Freixenet. En este Acto se hará entrega a los homenajeados de una medalla conmemorativa. Los miembros de la SECyTA que recibirán el homenaje son: Joan Albaigès, Emilio Gelpí, Isabel Martínez Castro, Manuela Juárez y Luis Esteban. En la misma cena, está previsto que otras sociedades, como la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA) y la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM), también rindan un homenaje a sus miembros más destacados.

## 2.5. VII Edición de los Premios José Antonio García Domínguez.

La VII Edición de los Premios José Antonio García Domínguez se ha convocado coincidiendo con la celebración de las 13<sup>as</sup> Jornadas de Análisis Instrumental. El Presidente explica a los asistentes que en esta edición de los premios se ha creído conveniente modificar las bases de concesión para dar una mayor proyección a los premios y permitir que todas las comunicaciones orales y tipo cartel presentadas en estas Jornadas puedan ser consideradas como candidatas a estos premios. En relación con el patrocinio, la empresa Bruker subvenciona, como en ediciones anteriores, estos premios con 2.100 euros. La entrega de los premios tendrá lugar el próximo 16 de Noviembre de 2011, durante la ceremonia de clausura de las 13<sup>as</sup> Jornadas de Análisis Instrumental.

## 2.6. Celebración de próximos congresos.

El Presidente anuncia a los asistentes la celebración en Tarragona en Noviembre de 2012 de la próxima Reunión Científica de la SECyTA (XII<sup>a</sup> Reunión de la SECyTA, XLI GCTA). La Reunión estará presidida por la Dra. Rosa Maria Marcé Recasens, Catedrática del Departamento de Química Analítica y Química Orgánica de la Universidad Rovira i Virgili. En el punto 5 del Orden del día se realizará una pequeña presentación de la XII<sup>a</sup> Reunión Científica de la SECyTA.

Por otro lado, se ha recibido por parte del Dr. Alejandro Cifuentes la propuesta de organización conjunta de la XIII<sup>a</sup> Reunión Científica de la SECyTA (2013) y el 20<sup>th</sup> *International Symposium on Electro- and Liquid Phase Separation-Techniques* (ITP-2013),

que tendrá lugar en Puerto de la Cruz (Tenerife) del 8 al 11 de Octubre 2013. Por último, la Dra. Begoña Jiménez ha solicitado la colaboración de la SECyTA en la organización del 34<sup>th</sup> *International Symposium on halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs) – Dioxin 2014*, que tendrá lugar en Madrid en agosto/septiembre de 2014, y del cual es Presidenta.

Para finalizar este punto del Orden del día, el Presidente da las gracias a todos los miembros de la Junta de Gobierno por el trabajo realizado y el apoyo recibido durante estos cuatro años de mandato, y hace extensivo su agradecimiento a todos los miembros de la SECyTA.

## 3. Informe de la Secretaria.

### 3.1. Socios de la SECyTA.

Desde la última Asamblea General, celebrada el 13 de Septiembre de 2010 en Valencia, hasta hoy, 15 de Noviembre de 2011, se han recibido un total de 51 altas y 21 bajas. En el listado actual de Secretaría el número de socios a día de celebración de esta Asamblea es de 582 Socios.

### 3.2. Ayudas concedidas por la SECyTA.

Se han concedido 4 ayudas (500 euros/ayuda) para la asistencia a congresos internacionales distribuidos de la siguiente forma:

- 2 ayudas para la asistencia al 36<sup>th</sup> *International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques – HPLC 2011* (Budapest, Hungría, del 19 al 23 de Junio de 2011),
- 1 ayuda para la asistencia al *II International Conference on Food-omics* (Cesena, Italia, del 22 al 24 de Junio de 2011), y
- 1 ayuda para la asistencia al 31<sup>st</sup> *International Symposium on halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs)- Dioxin 2011* (Bruselas, Bélgica, del 21 al 25 de Agosto de 2011)

En el caso de las 13<sup>as</sup> Jornadas de Análisis Instrumental, la SECyTA ha concedido un total de 45 becas de inscripción (45x170 euros) y 30 ayudas de viaje (30x150 euros) a jóvenes investigadores socios de la SECyTA para su asistencia al mencionado congreso.


# Deje que su trabajo fluya.

El sistema Milli-Q® Integral pone en su mano agua purificada y ultrapura.

- El concepto POD (punto de suministro) dual ahorra espacio convenientemente.
- Reduce gastos de mantenimiento y de agua gracias a la exclusiva tecnología Elix®.

Más información [www.millipore.com/ultrapure](http://www.millipore.com/ultrapure)



Merck Millipore is a division of  MERCK

### 3.3. Congresos patrocinados por la SECyTA.

La SECyTA ha patrocinado la *III Reunión Nacional de Dioxinas, Furanos y Compuestos Orgánicos Persistentes relacionados*, celebrado en Santander el 31 de junio al 1 de julio de 2011, con la concesión de 2 becas de inscripción y sendas ayudas de viaje por un valor total de 500 euros (2 x 250 euros). Así mismo, se han patrocinado los congresos: *Symposium on Emerging Pollutants, Water Treatment and Remediation* (Barcelona, 23-24 de Marzo de 2011) y el *V Workshop Nanociencia y Nanotecnología Analíticas 2011* (Toledo, 21-23 de Septiembre de 2011) con becas de inscripción y ayudas de viaje. En este caso, no se ha recibido por parte de miembros de la SECyTA de ninguna solicitud para la asistencia a estos dos congresos.

### 3.4. Temas Generales.

Se ha modificado la Normativa sobre la concesión de becas y ayudas de viajes para la asistencia a congresos nacionales e internacionales, aprobada por la Junta de Gobierno el 3 de Febrero de 2011. Así mismo, se ha realizado la justificación de la ayuda concedida por el Ministerio de Ciencia e Innovación para la organización de la IX Reunión Científica de la SECyTA (San Sebastián, 2009) y, por último, se ha convocado la VII Edición de los Premios José Antonio García Domínguez, patrocinados por Bruker.

Por otro lado, el Secretario informa sobre el Acto de nombramiento como Académico de la Real Academia de Ciencias Exactas, Física y Naturales del Prof. Georges A. Guiochon, Socio de Honor de la SECyTA, que tuvo lugar el 10 de mayo 2011 en Madrid. Por último, se comunica a los asistentes los congresos patrocinados por la SECyTA durante el año 2011 y se informa de la participación de la SECyTA como Sociedad colaboradora del HPLC 2012 (*38<sup>th</sup> International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques*), que se celebrará del 16 a 21 de febrero de 2012 en Anaheim (CA, USA).

Por último, el Secretario da las gracias a todos los miembros de la Junta de Gobierno por la colaboración y ayuda prestada sin la cual no hubiera podido desarrollar su trabajo y agradece también a todos los socios de la SECyTA por la comprensión y el apoyo recibido durante estos cuatro años.

## 4. Informe de la Tesorera.

### 4.1. Estado actual de las Cuentas de la Asociación.

La Tesorera de la SECyTA, Dra. Begoña Jiménez, presenta el estado de cuentas y el Balance anual de ingresos y gastos correspondientes al ejercicio 2011 (enero-noviembre 2011) cuyo balance es positivo. Queda pendiente proceder al cobro de las cuotas de socios correspondiente al año 2011 y contabilizar los gastos derivados de las becas concedidas en las 13as JAI. Así mismo, la Dra. Begoña Jiménez presenta el balance detallado de los ingresos y gastos contabilizados desde 2004 hasta noviembre de 2011, período en que ha desempeñado el cargo de Tesorera de la SECyTA, y que, igualmente, presenta un balance positivo.

Por otro lado, la Tesorera pone de manifiesto el elevado coste que supone para la Asociación la devolución de los recibos correspondientes al cobro de las cuotas de socios y ruega a los asistentes que comuniquen cualquier cambio de los datos bancarios para evitar o minimizar estos gastos en la medida de lo posible.

Por último, la Dra. Begoña Jiménez agradece a todos los miembros de la SECyTA la colaboración prestada que le ha permitido gestionar eficazmente los temas económicos de la Sociedad.

## 5. Próximos Congresos.

### 5.1. XIIª Reunión Científica de la SECyTA, Tarragona 2012.

En este punto del Orden del día, el Presidente da la palabra a la Dra. Rosa María Marcé para que presente la XIIª Reunión Científica de la SECyTA, que se celebrará en Tarragona en Noviembre de 2012. Durante la exposición, se presentan diversos aspectos relativos a la organización de la Reunión, así como temas de interés relacionados con la ciudad de Tarragona y de la Universidad Rovira i Virgili. Por último, la Dra. Marcé invita a los asistentes y a los miembros de la SECyTA a participar en la próxima Reunión Científica de la SECyTA en 2012.

### 5.2. XIIIª Reunión Científica de la SECyTA - ITP 2013, Puerto de la Cruz, Tenerife.

A continuación, el Presidente da la palabra a la Dra. Elena Ibáñez, que presenta en nombre de los

Presidentes del 20<sup>th</sup> *International Symposium on Electro- and Liquid Phase Separation-Techniques* (ITP-2013), Drs. Alejandro Cifuentes y Miguel Ángel Rodríguez-Delgado, la propuesta de organización conjunta del ITP 2013 y la XIII<sup>a</sup> Reunión Científica de la SECyTA. Así mismo, se presentan aspectos relativos a la organización, como la sede del congreso, disponibilidad hotelera, infraestructuras, etc., y se invita a los asistentes a participar en dicho congreso.

### 5.3. 34<sup>th</sup> *International Symposium on halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs) – Dioxin 2014. Madrid 2014.*

La Dra. Begoña Jiménez, Presidenta del 34th *International Symposium on halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs) – Dioxin 2014*, que se celebrará en Madrid en Agosto/Septiembre de 2014, presenta los temas más relevantes del congreso, como la sede del congreso, composición de los Comités Científico y Organizador, campos de aplicación y otros aspectos organizativos de interés para los asistentes. La Dra. Jiménez finaliza su intervención invitando a los asistentes a la participación al *Dioxin 2014* y agradece a la SECyTA la colaboración que ha ofrecido.

## 6. Elecciones a la Junta de Gobierno (2011).

Dado que aún no ha finalizado el escrutinio de la votación, el Presidente propone a los asistentes que este punto del Orden del día se trate después del punto dedicado a Ruegos y Preguntas.

## 7. Ruegos y preguntas.

- En este punto del orden del día, la Dra. Mercedes de Frutos ruega a la Junta de Gobierno que la información relativa a las personas homenajeadas pueda darse a conocer a los miembros de la SECyTA con una mayor antelación para favorecer la participación en el Acto de Homenaje. Así mismo, propone que dicho Acto se celebre en un marco más cercano a los miembros de la Asociación, ya sea durante el transcurso del propio congreso o en la cena gala siempre que ésta se encuentre incluida en la inscripción del congreso. El Presidente responde afirmativamente a la propuesta de informar a los miembros de la SECyTA del Acto de Homenaje con una mayor antelación y propondrá a la nueva Junta de Gobierno estudiar diversas formulas para fomentar y favorecer la

participación de los miembros de la Asociación en futuros homenajes. La razón de celebrar este Homenaje cada tres años coincidiendo con las JAI es para dar un mayor realce al Acto en sí mismo. No obstante, hasta el momento ha sido difícil conseguir que la cena de las JAI pueda estar incluida en la inscripción, pero se intentará que sea así en futuras ediciones.

- La Dra. Mercedes de Frutos propone que en próximos congresos la organización de las sesiones de Discusión de Pósteres permitan a los interesados conocer con una cierta antelación la participación en las mismas. En este sentido, el Secretario responde en esta edición de las JAI no ha sido podido organizar las sesiones de discusión de carteles de la forma que habitualmente se realiza en las Reuniones de la SECyTA, en donde de forma explícita se comunica a los interesados con una cierta antelación los pósteres que serán discutidos en las correspondientes sesiones. No obstante, este es un tema a mejorar en próximas ediciones de las JAI.

- La Dra. Carolina Simó toma la palabra para preguntar a los integrantes de la Mesa sobre la obligatoriedad de realizar las comunicaciones orales en inglés para ser consideradas como candidatas al Premio José Antonio García Domínguez. El Presidente responde que se recomienda que se hagan en inglés, tal y como se indica en las bases de premio, para fomentar su uso entre los asistentes y conseguir que en un futuro próximo nuestra reunión pueda ser considerada como internacional.

En este punto del Orden del día y a la vista de que no hay más ruegos ni preguntas, el Presidente aprovecha para recordar a los asistentes la posibilidad de enviar los trabajos presentados en las 13<sup>as</sup> JAI en forma de artículos a la revista *Journal of Chromatography A* y a un número especial de la revista *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. El proceso a seguir para el envío y revisión de los artículos es el habitual con la salvedad de indicar al editor que el artículo ha sido presentado en este congreso.

El Presidente da la palabra al Dr. F. Javier Moreno, redactor del Boletín, para que informe sobre temas relacionados con la revista. El Dr. Moreno anuncia a los asistentes que, aparte de las secciones habituales, se han incluido nuevas secciones relativas a la resolución de dudas y problemas en Cromatografía, informa-

# Aumenta tu productividad

solventando tus retos cromatográficos

## Un paso adelante en el muestreo automático

La calidad de los resultados en cromatografía de gases depende de diversos factores, la estabilidad del sistema cromatográfico, la robustez y sensibilidad del detector, la habilidad del analista en la ejecución de la preparación de muestra...

Dentro de este proceso, la preparación de muestra y su introducción en el sistema cromatográfico suponen pasos fundamentales en la obtención de datos analíticos repetitivos y fiables.

El muestreador automático Thermo Scientific Triplus RSH posibilita la manipulación robótica de la muestra, de manera que añade la utilización de ciclos avanzados de manipulación de muestra a los modos de inyección de líquidos, espacio de cabeza y microextracción en fase sólida (SPME).

Tus resultados mejorarán en precisión y reproducibilidad, a la vez que tu laboratorio incorporará ventajas únicas en la operación desatendida del sistema y flexibilidad en la manipulación de la muestra.

### Precisión Excepcional

- Funcionamiento reproducible
- Preparación básica de muestras y patrones automatizada
- Exactitud y fiabilidad

### Flexibilidad Inigualable

- Cambio automático del modo de inyección sin intervención del usuario
- Inyección precisa de micro-muestras
- Ajuste automático de la técnica de inyección

### Máxima Productividad

- Capacidad para un gran número de muestras
- Diseñado para realizar análisis 24/7 totalmente desatendidos
- Robustez



# máximo tiempo útil de funcionamiento

En el análisis de rutina siempre hay más muestras que tiempo. El sistema **ISQ GC-MS** le conducirá al progreso maximizando el tiempo útil de funcionamiento del instrumento. Analice más muestras - por día, semana, por año - y no rompa nunca el vacío en su **GC-MS** para limpiar la fuente. El **ISQ GC-MS** le ofrece también una inigualable productividad, proporcionándole sus datos analíticos con mayor rapidez que nunca. Nuestros sistemas **GC-MS** harán su laboratorio más productivo.

## productividad sin límites

• Explore las características de este gran progreso en [thermoscientific.com/isq](http://thermoscientific.com/isq)



### ISQ

El sistema más robusto y productivo para el análisis de rutina.

- El diseño de fuente proporciona mayor tiempo útil de funcionamiento
- Intercambio de fuente sin necesidad de romper el vacío
- Mayor velocidad de barrido, más muestras por hora
- Diseño del software orientado al flujo de trabajo

**Thermo**  
S C I E N T I F I C

CONTACTE CON NOSOTROS EN:

**Thermo Fisher Scientific S.L.U.**  
C/ Valportillo Primera nº 22  
28108 Alcobendas, Madrid

Teléfono: 91 484 59 51  
Email: [analyze.es@thermofisher.com](mailto:analyze.es@thermofisher.com)

ción bibliográfica de artículos de interés y libros publicados relacionados con la Cromatografía, calendario de actividades, y un apartado dedicado a Curiosidades Analíticas. Así mismo, anima a los socios de la SECyTA a que envíen artículos para su publicación en el Boletín y ruega a los asistentes que hagan llegar sus sugerencias para mejorar o ampliar las secciones del Boletín. Al final de su intervención, la Dra. Mercedes de Frutos quiere agradecer públicamente a los miembros del Boletín el trabajo realizado y les anima a seguir en esta excelente línea.

Antes de finalizar este punto del Orden del día, el Secretario y la Tesorera de la SECyTA comunican a los asistentes que, una vez finalizada la Asamblea, se procederá a la entrega del cheque de ayuda de viaje a los becarios de esta Reunión Científica, previo nombramiento por orden alfabético de los mismos.

Continuación del punto 6 del Orden del día: Elecciones a la Junta de Gobierno.

Una vez finalizado la votación de los socios asistentes y realizado el escrutinio por parte de los miembros de la Mesa Electoral, tanto de los votos presenciales como los votos enviados por correo, se procede a la lectura por parte del Secretario del Acta de Votación entregada por el Presidente de la Mesa Electoral, Dr. José Carlos Díez-Masa. Los resultados de la votación son los siguientes:

Votos emitidos válidos: 107 (88 votos en Sala y 19 recibidos por correo)

Votos nulos: 0

El reparto de los votos emitidos ha sido el siguiente:

Cargo	Candidato/a	Votos
Presidenta	Dra. María José González Carlos	99
Vicepresidenta	Dra. Elena Ibáñez Ezequiel	102
Secretaria	Dra. Belén Gómara Moreno	95
Tesorero	Dr. Jordi Díaz Ferrero	97
Vocales	Dr. Joan Grimalt Obrador	96
	Dra. Begoña Jiménez Luque	95
	Sr. José Monge Cónsul	89
	Sr. José María Sangenís	83
	Dr. Fco. Javier Santos Vicente	98
	Dra. María Luz Sanz Murias	92
	Sr. Juan Solé Ribalta	92

Como resultado de la votación, los nuevos miembros de la Junta de Gobierno de la SECyTA son los siguientes:

Presidenta:	María José González Carlos (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)
Vicepresidenta:	Elena Ibáñez Ezequiel (Instituto de Investigación en C. de la Alimentación, CIAL-CSIC, Madrid)
Secretaria:	Belén Gómara Moreno (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)
Tesorero:	Jordi Díaz Ferrero (Instituto Químico de Sarriá, Universitat Ramon Llull, Barcelona)
Vocales:	Joan Grimalt Obrador (Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua, IDAEA- CSIC, Barcelona)
	Begoña Jiménez Luque (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)
	José Monge Cónsul (Agilent Technologies Spain, S.L., Barcelona)
	José María Sangenís (Thermo Fisher Scientific, Barcelona)
	Fco. Javier Santos Vicente (Universidad de Barcelona, Barcelona)
	María Luz Sanz Murias (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)
	Juan Solé Ribalta (HiTC, S.A., Barcelona)

Toma la palabra el Presidente, Dr. Joan Grimalt para agradecer en primer lugar el trabajo realizado por la Mesa Electoral en el proceso de votación y, en segundo, a los miembros de la SECyTA por la elevada participación en estas elecciones.

Sin más asuntos que tratar, se da por concluida la 11ª Asamblea General de la SECyTA a las 19:15 h. del 15 de noviembre de 2011.

**Francisco Javier Santos Vicente**  
*Secretario de la SECyTA*



## NUEVOS SOCIOS DE LA SECYTA (DEL 13-12-2010 AL 07-06-2011)

- |  |  |
|--|--|
| 1605<br>García Bermejo, Ángel<br>C/ San Anastasio, 4, 14C derecha<br>28005-Madrid  | 1617<br>García Rodríguez, Aida<br>C/ Mercat 4, 1º<br>17497-Portbou (Girona)  |
| 1606<br>Guijarro Díez, Miguel<br>C/ Rufino Blanco, Portal 9ºA, Piso 10º A<br>19003-Guadalajara   | 1618<br>Valdés Tabernero, Alberto<br>Plaza los Residenciales 1, 1ºB<br>28770-Colmenar Viejo (Madrid)   |
| 1607<br>Company Arumi, Mª Dolores<br>C/ L'Esglesia, 14, 1r 1ª<br>08504-Barcelona   | 1619<br>Medina Casanellas, Sílvia<br>Dpto. de Química Analítica. Facultad de Química.<br>Universidad de Barcelona<br>Avda. Diagonal 645,3º<br>08028-Barcelona                |
| 1608<br>Yáñez Arellano, Karen<br>Dpto. de Química Analítica-Grupo TESEA. Edificio<br>QUIFIMA. Univ. de Valladolid<br>Campus Miguel Delibes, Calle del Cementerio s/n<br>47011-Valladolid | 1620<br>Pedrón Ruíz, Isabel<br>Dpto. de Química Analítica. Facultad de Química.<br>Universidad de Valencia<br>C/ Doctor Moliner 50<br>46100-Burjassot (Valencia)             |
| 1609<br>Regueiro Vilar, Olga<br>Instituto de Química Orgánica General - CSIC<br>C/ Juan de la Cierva, 3<br>28006-Madrid  | 1621<br>Gilart Alzuria, Núria<br>C/ Sant Joan 7<br>25100-Almacelles (Lleida)   |
| 1610<br>Fariña Gómez, Noemí<br>Instituto de Química Orgánica General - CSIC<br>C/ Juan de la Cierva, 3<br>28006-Madrid   | 1622<br>Fontal Maestre, Marta<br>Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua<br>(IDAEA)-CSIC.<br>C/Jordi Girona 18-26<br>08034-Barcelona                          |
| 1611<br>Quintas Soriano, Guillermo<br>C/ Maestro Gonzalvo, 25, 2<br>46005-Valencia   | 1623<br>Víctor Ortega, Mª Dolores<br>C/ Manuel Solano 22<br>23750-Arjonilla (Jaén)   |
| 1612<br>Bustamante Rangel, Myriam<br>Dpto. de Química, Nutrición y Bromatología.<br>Universidad de Salamanca<br>Plaza de los Caídos s/n<br>37008-Salamanca                               | 1624<br>Navarro Pascual-Ahuir, María<br>Dpto. de Química Analítica. Facultad de Química.<br>Universidad de Valencia<br>C/ Doctor Moliner 50<br>46100-Burjassot (Valencia)    |
| 1613<br>Bolívar Subirats, Gabino<br>Camí de Dalt Sant Joan, 22<br>07701-Maó (Illes Balears)  | 1625<br>Carrasco Correa, Enrique Javier<br>Dpto. de Química Analítica. Facultad de Química.<br>Universidad de Valencia<br>C/ Doctor Moliner 50<br>46100-Burjassot (Valencia) |
| 1614<br>Vallecillos Marsal, Laura<br>C/ Gladiol 11<br>43830-Torredembarra (Tarragona)  | 1626<br>Beneito Cambra, Miriam<br>C/ Camino Estación de Arriba 7<br>46630-La Font de la Figuera (Valencia)   |
| 1615<br>Valls Cantenys, Carme<br>C/ Sebastià Trullol 31<br>17600-Figueres (Girona)   |  |
| 1616<br>Lozano Miralles de Imperial, Blanca<br>C/ Canet 37, 2º 5ª<br>08017-Barcelona   |  |



## Alphagaz CO<sub>2</sub> SFC, la oferta de Air Liquide para cromatografía de fluidos supercríticos.

Air Liquide le ofrece a la industria farmacéutica la solución para sus necesidades de CO<sub>2</sub> líquido.

Una oferta que incluye el gas, la instalación y los servicios asociados. De este modo se garantizan la seguridad, fiabilidad y calidad en el suministro del gas de forma continua y estable a través de canalizaciones de distribución certificadas.

Alphagaz CO<sub>2</sub> SFC cumple con la farmacopea europea y se adapta a todos los equipos de SFC.

Confíe sus necesidades de CO<sub>2</sub> líquido a Air Liquide ya que cuenta con una amplia experiencia y tecnología patentada fiable y simple.

*Air Liquide contribuye a la fabricación de múltiples productos de nuestro día a día y a la preservación de la vida, dentro de una gestión de desarrollo sostenible, gracias a soluciones innovadoras basadas en las últimas tecnologías.*



# El producto, la instalación y los servicios que su laboratorio necesita

- 1627  
Díez Municio, Marina  
Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación  
(CIAL, CSIC-UAM)  
C/Nicolas Cabrera 9  
28049-Cantoblanco (Madrid)
- 1628  
Gotor Navarra, Gemma  
C/ Valencia 559, 3º 2ª  
08025-Barcelona
- 1629  
Alonso Soto, Miriam  
Avda. de Barberà 295, 5º 1ª  
08203-Sabadell (Barcelona)
- 1630  
Quintela Bermejo, Juan Manuel  
C/ Les Fonts 30  
08211-Castellar del Vallès (Barcelona)
- 1631  
Nolla Garrido, Celia  
C/ Josep Tarradellas 13, 3er 2ª  
08760-Martorell (Barcelona)
- 1632  
Pérez Castaño, Estefanía  
Dpto. de Química Analítica. Facultad de Ciencias.  
Universidad de Granada. Campus Fuentenueva s/n  
18071-Granada
- 1633  
Corcellas Carramiñana, Cayo  
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua  
(IDAEA)-CSIC.  
C/Jordi Girona 18-26  
08034-Barcelona
- 1634  
Monge Consul, José  
Agilent Technologies S.L.  
C/ Balmes 236  
08006-Barcelona
- 1635  
Silva Santos, Joana  
Rua Prof. Luis A. Oliveira Ramos 907  
4730-783-Vila Verde (Portugal)
- 1636  
García Altares Pérez, María  
Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries (IRTA)  
Carretera de Poble Nou, Km 5,5  
43540-Sant Carles De La Ràpita (Tarragona)
- 1637  
Rodríguez Espelta, Yolanda  
Pasaje Salvatella 36, 2º 1ª  
08924-Santa Coloma De Gramanet (Barcelona)
- 1638  
Arcos Manso, Altamira  
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua  
(IDAEA)-CSIC.  
C/ Jordi Girona 18-26  
08034-Barcelona
- 1639  
Díaz-Faes López, Teresa  
C/ La Mata 20, Nº II  
33180-Noreña (Asturias)1640  
Hueso Ibáñez, Rafael  
Instituto en Formación de Nutrición Animal (IFNA) /  
EEZ/ CSIC  
C/ Camino del Jueves s/n  
18100-Armilla (Granada)
- 1641  
Escudero Francos, María Antonia  
C/ Diecinueve de Julio, 6, 6º A  
33002-Oviedo (Asturias)
- 1642  
Hernández Mesa, Maykel  
Departamento de Química Analítica. Universidad de  
Granada.  
Campus de Fuentenueva s/n  
18071-Granada
- 1643  
Zafra Gómez, Alberto  
Departamento de Química Analítica. Universidad de  
Granada.  
Campus de Fuentenueva s/n  
18071-Granada
- 1644  
Domínguez Fernández, Carmen  
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua  
(IDAEA)-CSIC.  
C/Jordi Girona 18-26  
08034-Barcelona
- 1645  
Airado Rodríguez, Diego  
C/ Pedro de Valencia 5  
06469-La Coronada (Badajoz)
- 1646  
Castro López, María del Mar  
C/ San Julián de Vigo 51  
15314-Paderne (A Coruña)
- 1647  
Megías Pérez, Roberto  
C/ Olivar 30  
45130-Los Navalucillos (Toledo)
- 1648  
Rodríguez-Navas González, Carlos  
Dpto. de Química. Facultad de Ciencias.  
Universitat de les Illes Balears (UIB)  
Ctra. Valldemossa, km. 7,5  
07122-Palma de Mallorca (Illes Balears)
- 1649  
Maya Alejandro, Fernando  
C/ Gloria 34  
07620-Llucmajor (Illes Balears)
- 1650  
Radovic, Jagos  
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua  
(IDAEA)-CSIC.  
C/ Jordi Girona 18-26  
08034-Barcelona



## CONGRESOS CELEBRADOS

### 36<sup>th</sup> International Symposium on High Performance Liquid Separations and Related Techniques.

Budapest, Hungría, 19-23 de junio de 2011.

El XXXVI *International Symposium on High Performance Liquid Separations and Related Techniques* tuvo lugar en Budapest (Hungría) en el Budapest Congress and World Trade Center del 19 al 23 de junio de 2011. En esta ocasión el simposio fue organizado por la *Hungarian Society for Separation Sciences* (HSSS) y respaldado por otras doce organizaciones científicas entre las que figuran la *Hungarian Academy of Sciences*, la *American Chemical Society* o la *European Society for Separation Science*. El comité científico, organizador y honorario estuvo representado por reconocidos investigadores de diferentes países tanto europeos como de China, Japón y de Estados Unidos, y estuvo presidido por los profesores Attila Felinger, presidente de HSSS, (Universidad de Pécs, Hungría) y László Szepesy, presidente honorario de HSSS, (Budapest, Hungría).

La inauguración del congreso tuvo lugar la tarde del domingo día 19 de junio con una ceremonia de apertura a cargo del profesor Attila Felinger. A continuación se presentaron los premios Csaba Horváth Memorial y la Medalla Halász de la HSSS en reconocimiento por la excelencia en la investigación en técnicas de separación. El profesor Gyula Vigh de la *Texas A&M University* (EEUU) fue galardonado con la medalla Halász y el profesor Günther Bonn de la *University of Innsbruck* (Austria) recibió el premio Csaba Horváth Memorial. Después de la ceremonia de entrega de premios, tuvo lugar la recepción de bienvenida, patrocinada por Agilent Technologies, en los mismos pasillos del centro de congresos.

El HPLC 2011 fue un foro internacional para la discusión científica de los métodos de cromatografía líquida de elevada eficacia en sus diversas formas, y de otras técnicas de separación complementarias, tales como la electroforesis, electrocromatografía, campo de flujo de fraccionamiento, cromatografía de fluidos supercríticos y técnicas acopladas, como LC-MS y CZE-MS. Otros campos, como por ejemplo la microfluídica o el lab-on-chip también fueron incluidos. Durante los 5 días de congreso, se realizaron un total

de 134 comunicaciones orales, que abarcaron las diferentes temáticas expuestas anteriormente. Dichas comunicaciones se estructuraron en 8 conferencias plenarias, 9 conferencias tutoriales, 30 *keynotes* y 87 presentaciones orales, organizadas en tres sesiones paralelas.

Asimismo, se expusieron casi 800 comunicaciones en formato póster, divididas en dos sesiones debido a este gran volumen de comunicaciones. La primera sesión se realizó durante los dos primeros días de congreso, y abarcó un total de 16 temáticas diferentes entre las que destacaban los avances más recientes en técnicas de separación, microfluídica, análisis clínico y forense, técnicas acopladas, separaciones quirales o metabolómica y biomarcadores. En la segunda sesión, que tuvo lugar durante los dos últimos días de congreso, se englobaron las presentaciones dedicadas a temáticas como las nuevas tecnologías de columnas cromatográficas y fases estacionarias o las nuevas metodologías desarrolladas para el análisis en agricultura, medio ambiente y seguridad alimentaria, así como las presentaciones dedicadas al estudio de la teoría de los mecanismos de retención y al desarrollo de modelos cromatográficos.

Durante los días centrales del congreso distintas casas comerciales (Waters, Agilent Technologies, Thermo Scientific, AB SCIEX/Eksigent, Shimadzu, Sigma Aldrich, Merck, Bruker Daltonik GmbH, Phenomenex, Chiral Technologies, Beckman Coulter, Dionex) ofrecieron seminarios entre las sesiones de mañana y tarde del congreso en los que se mostraron los últimos y más novedosos avances instrumentales.

Un amplio programa social brindó la oportunidad de experimentar la cultura, comida y costumbres húngaras, así como poder descubrir Budapest y sus alrededores. El mismo día de la inauguración del HPLC 2011 pudimos asistir a un espectáculo de animación con arena a cargo de Ferenc Cakó, un afamado artista húngaro premiado en el *Seoul International Cartoon & Animation Festival* de 2003. El lunes tuvo lugar un concierto de órgano organizado exclusivamente para los participantes del Congreso en la Basílica de San Esteban en el centro de la ciudad, donde el organista András Gábor Virágh ofreció una selección de las

obras del compositor húngaro Ferenc Liszt. La cena oficial del Simposio HPLC 2011 se llevó a cabo en el Parque Ecuéstre Lázár, Domony Valley, a unos 30 km de Budapest, donde disfrutamos de la cocina, hospitalidad y entretenimiento húngaro.

El HLPC 2011 Budapest fue clausurado el jueves 23 de junio con una ceremonia en la que se entregaron los premios a los mejores pósteres a cargo de Agilent Technologies. El primer premio fue para Matthias Verstraeten, de la *Vrije University* de Bruselas, por el poster titulado “*Switching from Constant Flow Rate to Constant Pressure Elution Mode*”. También se entregó el premio “*Csaba Horváth Young Scientist Award*” a la mejor comunicación oral realizada por jóvenes investigadores. El propósito de este premio es honrar la memoria del Profesor Csaba Horváth y animar a los jóvenes científicos a participar en los congresos de la serie HPLC. El premio fue también para Matthias Verstraeten por la comunicación oral titulada “*Novel Thermal Modulation for Multi-dimensional Liquid Chromatography Separations using Low-Thermal-Mass LC*”.

**Irene Maijó Ferré**

*Departament de Química Analítica i Química Orgànica,  
Facultad de Química,  
Universitat Rovira i Virgili*

**Élida Alechaga Silva**

*Departamento de Química Analítica,  
Facultad de Química,  
Universitat de Barcelona*

## 2<sup>nd</sup> International Conference on Foodomics

Cesena, Italia, 22-24 de Junio de 2011

El congreso “*2<sup>nd</sup> International Conference on Foodomics*”, organizado por la Universidad de Bolonia, tuvo lugar en la ciudad de Cesena (Forlì-Cesena, Italia) entre los días 22 y 24 de junio de 2011. El congreso estaba enfocado a los avances más recientes en el área de los alimentos y la nutrición humana desde un punto de vista de la aproximación *ómica*. La unión de Genómica, Proteómica y Metabolómica se puso de manifiesto en forma de comunicaciones orales de diversa índole. El congreso se dividió en tres secciones diferentes, que explican

muy bien el contexto multidisciplinar de Foodomics: *Food Quality and Biodiversity, Optimal Nutrition (Nutrigenetics and Nutrigenomics), Ageing and Disease Prevention, e Industrial Processing and Biotechnology*.

El primer día, Alessandra Bordoni nos dio la bienvenida a Foodomics 2011 junto con las distintas autoridades, seguido de una breve aportación por parte de los distintos invitados para presentar el congreso. Abrió la sesión de comunicaciones orales Alejandro Cifuentes, primero en emplear el término Foodomics. Con la definición de este término “*A discipline that studies the Food and Nutrition domains through the application of advanced omics techniques to improve consumer's health benefits and confidence*”, presentaba las primeras ideas sobre el tema del congreso. Esta sesión se englobaba bajo el título Food Quality and Biodiversity, explorando temas relacionados con Proteómica, Metabolómica y Genómica. La comunicación oral realizada por Ana María Gómez-Caravaca (Universidad de Granada) acerca de la determinación simultánea de compuestos fenólicos y saponinas en quínoa por HPLC-ESI-TOF-MS demostró un alto nivel en el ámbito nacional. A última hora de la tarde, la sesión de póster se celebró de manera simultánea a un cóctel ofrecido en uno de los mejores hoteles de la ciudad. Alrededor de 80 pósters dominaban la sala mientras los asistentes exploraban la cocina italiana.

El segundo día de congreso, Didier Dupont (Francia), Clarissa Gerhäuser (Alemania), Fabio Virgili (Italia), Tuulia Hyötyläinen (Finlandia), Susan Duthie (Reino Unido) y Patrizia Riso (Italia) llenaron la sala con ideas y trabajos relacionados con términos tan actuales como Nutrigenómica y Nutrigenética. Por la tarde, las presentaciones se enfocaron a la prevención de enfermedades y la importancia de la nutrición para la salud, siempre desde el punto de vista *ómico*, con temas como el empleo de la aproximación *ómica* en estudios de envejecimiento (Claudio Franceschi, Italia) y la relación entre el cáncer y la dieta (Dino Amadori, Italia).

Para completar, el tercer día, más centrado en la industria alimentaria, Romina Pedreschi (Bélgica) y Daniele del Río (Italia) destacaron por las presentaciones realizadas acerca de la Proteómica en alimentos procesados en relación con su alergenicidad y los



compuestos fenólicos como ingredientes funcionales. La clausura realizada por Francesco Capozzi presentó la labor realizada en la Universidad de Bolonia a través del departamento de Ciencias de los Alimentos (DISA) así como la “3<sup>rd</sup> International Conference on Foodomics” que se realizará, aún sin concretar el lugar de celebración, en 2013.

**Cristina Montealegre Dondarza**

*Dpto. Química Analítica e Ingeniería Química  
Universidad de Alcalá*

### **III Reunión Nacional de Dioxinas, Furanos y Compuestos Orgánicos Persistentes Relacionados.**

30 de junio y 1 de julio de 2011, Santander, España.

La tercera edición de la *Reunión Nacional de Dioxinas, Furanos y Compuestos Orgánicos Persistentes Relacionados* tuvo lugar durante los días 30 de junio y 1 de julio de 2011, teniendo lugar como sede el Salón de Actos de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales y de Telecomunicaciones de la Universidad de Cantabria, Santander.

El Comité Organizador estuvo presidido por el Dr. Daniel Gorri Cirella, y formado por los Servicios Científico-Técnicos de Investigación (SCTI) de la Universidad de Cantabria (UC) en colaboración con el Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). El Comité Científico fue integrado por reconocidos investigadores provenientes de diferentes puntos de la geografía española y del extranjero (Bélgica, Suecia y Suiza). Además, participaron una serie de colaboradores como son, la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA), la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM), Techno Spec, Thermo Scientifics, Waters, Agilent Technologies, el Gobierno de Cantabria y el Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

La finalidad de esta reunión fue dar continuidad a las anteriores ediciones celebradas en Madrid (2001) y A Coruña (2007), teniendo como objetivo facilitar el encuentro y difusión de los avances científico-técnicos entre los diferentes grupos que realizan su actividad investigadora y analítica en el campo de la determinación de Dioxinas y Furanos (PCDD/Fs) y, en

general, de Compuestos Orgánicos Persistentes (COP) en España, así como con otros organismos relacionados con la gestión de los compuestos antes mencionados.

La reunión se centró en la discusión de aspectos de interés y relevancia científico-técnicos como son: a) Nuevas metodologías de análisis, toma de muestra y problemática de matrices específicas, b) Validación de metodologías y control de la calidad, c) Evolución y perspectivas de las normativas legales y requisitos que deben cumplir los laboratorios, d) Vigilancia y control de COP a nivel nacional e internacional. Casos de estudio y e) Exposición en humanos.

El acto de bienvenida y la inauguración oficial se celebró el día 30 de junio. Por la mañana tuvo lugar la primera sesión, “*Formación, Fuentes e Inventarios*”, moderado por el Prof. Juan Conesa y la Dra. María Fresnedo San Román, y a continuación dos sesiones orales de póster. Por la tarde, se celebró la segunda, “*Metodologías Analíticas y Control de Calidad*”, moderado por el Dr. Esteban Abad y el Dr. Daniel Gorri. Este primer día dio lugar a dos conferencias plenarias expuestas por la Dra. Heidelore Fiedler (PNUMA, Subdivisión de Productos Químicos, Suiza) y por el Dr. Bert van Bavel (MTM Research Centre, Universidad de Örebro, Suecia).

La primera jornada finalizó con una cena en el edificio más emblemático y de mayor referencia de la ciudad, el Gran Casino, situado en la playa del Sardinero.

El día 1 de julio comenzó con la tercera sesión “*Alimentación Humana y Animal. Exposición Humana*”, moderado por la Prof. Dra. M<sup>a</sup> José González y el Dr. Gerardo Fernández Martínez, seguido de la tercera sesión de orales de póster. A continuación, tuvo lugar la cuarta sesión “*Distribución Global de los COP. Casos de Estudio*”, moderado por la Dra. Begoña Jiménez y el Dr. Ignacio Fernández, dando finalizada la mañana con una mesa redonda, dirigida por entidades de gran relevancia como la Agencia Española de Seguridad Alimentaria y Nutrición (AESAN) y el Ministerio de Medio Ambiente y Medio Rural y Marino (MARM). Esta jornada dio lugar a dos conferencias plenarias expuestas por el Dr. Jeff Focant (Universidad de Liege-CART, Bélgica) y por la Dra. María Dolores Hernando Guil (Centro Nacional de Referencia sobre

Contaminantes Orgánicos Persistentes, CNRCOP). Tras la comida, tuvieron lugar las últimas dos sesiones orales de póster.

Durante el acto de clausura se realizó la entrega de un premio debido a la participación de un sorteo gracias a la casa comercial Agilent Technologies.

Posteriormente, el Dr. Daniel Gorri hizo mención al gran éxito de la reunión por ser un punto de encuentro para grupos de investigación a nivel nacional de intercambio de ideas dando lugar a debates enriquecedores para todos los asistentes. Quiso expresar su agradecimiento al Comité Organizador, Científico, SECyTA, SEEM, y al resto de Instituciones y empresas por el apoyo económico, así como a los ponentes invitados y, en especial, al Dr. Esteban Abad por su inestimable ayuda en la organización de la Reunión. Asimismo, alabó el alto nivel de las ponencias dando por cumplidas las expectativas. En esta edición, a diferencia de las anteriores, para dar la posibilidad de presentar resultados a un mayor número de participantes, se incorporaron las comunicaciones orales breves (en forma de póster y presentación oral). En resumen, 82 fueron los participantes inscritos y el programa científico estuvo compuesto por un total de 5 presentaciones plenarias, 8 key-notes, 16 comunicaciones orales breves y 34 presentaciones en formato cartel, divididos éstos últimos en cuatro áreas: a) Formación, fuentes e inventarios, b) Metodologías analíticas y control de la calidad, c) Distribución global de los COP. Casos de estudio y d) Alimentación humana y animal. Exposición humana. En total se contó con 47 contribuciones y 3 comunicaciones técnicas de empresas.

Para dar continuidad a estas reuniones, dio la palabra al Dr. Juan A. Conesa, Catedrático de Ingeniería Química de la Universidad de Alicante, quien en primer lugar felicitó a la organización por estas jornadas *y en segundo lugar, adelantó que la IV Reunión Nacional de Dioxinas, Furanos y Compuestos Orgánicos Persistentes Relacionados*, tendrá lugar, aproximadamente entre septiembre y octubre de 2013, en Alicante. Por último se hizo mención al *International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants, DIOXIN2014*, que tendrá como sede, Madrid.

Para finalizar, queremos hacer constar nuestro agradecimiento a la Sociedad Española de

Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) por la beca de asistencia a congresos que nos fue concedida y nos permitió asistir a esta magnífica reunión.

**Lourdes Arellano Da Silva**

*Dpto. Química Ambiental  
IDAEA – CSIC, Barcelona*

**Laura Herrero Collantes**

*Dpto. Análisis Instrumental y Química Ambiental  
IQOG – CSIC, Madrid*

### **31<sup>st</sup> International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants**

21-25 de Agosto de 2011, Bruselas (Bélgica)

La trigésima primera edición de simposio Internacional sobre contaminantes orgánicos persistentes halogenados, Dioxin 2011 (*31<sup>st</sup> International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants*), se celebró en la capital Europea, Bruselas (Bélgica), entre el 21 y 25 de Agosto de 2011. El congreso tuvo lugar en el hotel Crowne Plaza Brussels - Le Palace, situado en el centro de la ciudad, muy próximo a los lugares de mayor interés turístico de la capital. Los profesores de la universidad de Lieja y Amberes, Dr. Jean-François (Jef) Focant y Dr. Prof. Adrian Focant Covaci, respectivamente, ejercieron como presidentes del simposio y junto con destacados investigadores belgas, formaron un competente comité local que desarrolló un excelente trabajo en este Dioxin 2011.

La ceremonia de apertura fue magistralmente conducida por el Dr. Focant y tras ella, tuvo lugar la primera sesión plenaria del simposio. El Dr. Courtney Sandau centró su conferencia en la importante relación entre las emergentes ciencias forenses y los contaminantes orgánicos persistentes (COP). El programa científico incluyó otras tres sesiones plenarias, cada una de ellas abriendo la programación diaria del congreso, que ahondaron en los efectos que los contaminantes orgánicos persistentes son susceptibles de producir en humanos con dos interesantes charlas expuestas por el Dr. Elly Den Hond y el Dr. Stuart Harrad, así como en la fauna silvestre, esta última presentada por el prestigioso Dr. Robert Letcher. Además de las sesiones plenarias, un total de 264 comunicaciones orales se presentaron en un máximo de 5 sesio-



nes paralelas por día. Entre ellas cabe destacar el gran número de estudios que se centraron en diferentes aspectos relacionados con los contaminantes orgánicos persistentes emergentes, principalmente compuestos perfluorados (PFCs) y retardantes de llama como el declorano plus (DP).

Como alternativa al tradicional póster impreso, la 31ª edición del Dioxin introdujo en su programa científico el póster digital (e-poster). Cada poster digital consistía en un máximo de 6 diapositivas de Power Point que podían consultarse en cualquier momento en distintas pantallas interactivas dispuestas para tal efecto en los salones del Hotel que acogió el simposio. Los autores de los pósters digitales dispusieron de un tiempo específico, recogido y esquematizado en el programa científico, para permanecer junto a las pantallas interactivas y, así, poder aclarar cualquier duda sobre sus trabajos a la audiencia del congreso. En total el Dioxin 2011 acogió 338 poster digitales.

Durante la ceremonia de clausura se otorgaron los premios Otto Hutzinger a seis jóvenes investiga-

dores. Los trabajos premiados incluyeron una gran variedad de disciplinas científicas así como de contaminantes objeto de estudio. Tres de los premios se destinaron a trabajos centrados en la presencia y la dinámica de los compuestos perfluorados y los retardantes de llama en distintos ecosistemas y organismos modelo. El resto de ganadores centraron sus investigaciones en los potenciales efectos tóxicos de distintos contaminantes orgánicos persistentes emergentes sobre los seres humanos. La ceremonia de clausura finalizó con una sugerente exposición centrada en la próxima edición del simposio que tendrá lugar en Cairns, Australia. La presentación corrió a cargo del que será el presidente del DIOXIN 2012, el Dr. Jochen Müller, generando grandes expectativas de cara a la reunión científica que tendrá lugar el próximo año.

**Jose L. Roscales**

*Dpto. de Análisis Instrumental y Química Ambiental  
Instituto de Química Orgánica General, IQOG  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas,  
CSIC*



*Queridos lectores,*

*Os seguimos animando a que participéis en la sección de “Curiosidades Analíticas”, enviándonos algunos aspectos o problemas que se os hayan presentado en vuestro trabajo del día a día.*

*Os recordamos que el objetivo principal es que todos veamos los problemas que pueden surgir con la Cromatografía y que no nos sorprendamos de si nos ocurre algo similar.*

*El Comité Editorial*



## CALENDARIO DE ACTIVIDADES

- 1. HTC-12: 12<sup>th</sup> International Symposium on Hyphenated Techniques in Chromatography and Hyphenated Chromatographic Analyzers.**  
1 - 3 Febrero de 2012. Brujas (Bélgica)

<http://www.ordibo.be/htc/>

- 2. MSB 2012: 27<sup>th</sup> International Symposium on Microscale Bioseparations and Analysis.**  
12 - 15 Febrero de 2012. Ginebra (Suiza)

Contacto:

Gerard Rozing (Conference CoChair)  
[www.MSB2012.org](http://www.MSB2012.org)

- 3. HPLC 2012: 38<sup>th</sup> International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques.**  
16 - 21 Febrero de 2012. Anaheim, CA (EE.UU.)

Contacto:

Frantisek Svec (Chairman)  
Renee Olson (Symposium Manager)  
CASSS  
5900 Hollis Street, Suite R3  
Emeryville, CA 94608  
510-428-0740  
rolson@casss.org • <http://www.hplc2012.org>

- 4. Pittcon 2012.**  
11 - 15 Marzo de 2012. Orlando Florida, EE.UU.)

Contacto:

<http://www.pittcon.org/>

- 5. 7<sup>th</sup> International Symposium on Recent Advances in POPs Analysis**  
18 - 19 Abril de 2012. Venecia (Italia)

Contacto:

<http://pops.thermo-bremen.com/>

- 6. 36<sup>th</sup> International Symposium on Capillary Chromatography (ISCC) and 9<sup>th</sup> GCXGC Symposium.**  
27 Mayo - 1 Junio de 2012. Riva del Garda (Italia)

Contacto:

Prof. Luigi Mondello (Chairman of 36 ISCC)  
Prof. Phillip Marriot (Chairman of 9th GCXGC Symposium)  
Chromaleont a spin-off of the University of Messina  
iscc@chromaleont.it • [www.chromaleont.it/iscc](http://www.chromaleont.it/iscc)

- 7. 8<sup>th</sup> Annual LC/MS/MS Workshop on Environmental Applications and Food Safety**  
2 - 4 Julio de 2012. Barcelona (España)

Contacto:

Dr. Mira Petrovic (Conference Secretariat)  
Catalan Institute for Water Research (ICRA)  
c/ Emili Grahit, 101. Girona (Spain)  
Fax: + 34 972 18 32 48  
mpetrovic@icra.cat  
[www.icra.cat/actividades/](http://www.icra.cat/actividades/)

- 8. ISC 2012: 29<sup>th</sup> International Symposium on Chromatography. ISSS 2012: 17<sup>th</sup> International Symposium on Separation Science.**  
9 - 13 Septiembre de 2012. Torun (Polonia)

Contacto:

Prof. Dr. Boguslaw Buszewski  
Mrs. Joanna Kowalska  
Nicolaus Copernicus University  
Faculty of Chemistry  
Chair of Environmental Chemistry & Bioanalytics  
7 Gagarin St., PL-87 100 Torun, Poland  
tel. +48 56 6114308 / +48 56 6114308  
Tel/Fax: +48 56 6114837  
symposium@isc2012.pl  
<http://www.isc2012.pl/>

- 9. ITP 2012: 19<sup>th</sup> International Symposium, Exhibit & Workshops on Electro- and Liquid Phase-separation Techniques.**  
30 Septiembre - 3 Octubre de 2012. Baltimore (Maryland, EE.UU.)

Contacto:

Prof. Ziad El Rassi (Chairman)  
ITP 2012 Symposium/Exhibit Manager  
Ms. Janet Cunningham, Barr Enterprises  
[LinkedIn.com/in/BarrEnterprises](http://www.linkedin.com/in/BarrEnterprises)  
301-668-6001  
janetbarr@aol.com  
<http://itp2012.okstate.edu/>

- 10. XII Reunión de la SECyTA.**  
14 - 16 Noviembre de 2012. Tarragona (España)

Contacto:

Rosa M<sup>a</sup> Mercé  
[www.quimica.urv.cat/secyta2012](http://www.quimica.urv.cat/secyta2012)



## ARTÍCULOS DE INTERÉS

La cromatografía de gases completa en dos dimensiones (GC×GC) es una potente técnica analítica que aporta una gran capacidad de resolución en análisis multiresiduo de muestras de elevada complejidad. Además, esta técnica permite obtener una elevada información sobre otros compuestos “*non-target*” o “no diana” pero presentes en la muestra de estudio gracias a la información derivada de los cromatogramas estructurados típicos de GC×GC. Estos cromatogramas estructurados permiten patrones de separación de distintas familias de compuestos químicos que posibilitan obtener información de las distintas familias de analitos presentes en la muestra e identificar los compuestos mayoritarios dentro de las mismas. Este último apartado resulta muy útil ya que podemos considerar dichos cromatogramas estructurados como huellas dactilares o “*fingerprints*” de cada muestra. De este modo, se podrían realizar comparaciones entre muestras en función de distintos factores como origen geográfico, procesos de manufacturación, envejecimiento, etc.

A continuación se presentan tres artículos científicos en los que se realiza un análisis comparativo entre muestras mediante la aplicación de técnicas de “*fingerprinting*” con GC×GC.

**“Profiling food volatiles by comprehensive two-dimensional gas chromatography coupled with mass spectrometry: Advanced fingerprinting approaches for comparative analysis of the volatile fraction of roasted hazelnuts (*Corylus avellana* L.) from different origins”**

C. Cordero, E. Liberto, C. Bicchi, P. Rubiolo, P. Schieberle, S.E. Reichenbanch and Q. Tao  
*J. Chromatography A*, 1217 (2010) 5848-5858

Este estudio describe la aplicación de técnicas avanzadas de *screening* basadas en el uso de métodos tipo “*fingerprinting*” para la caracterización de muestras de avellanas tostadas.

El tostado de las avellanas se consigue por distintos tratamientos térmicos que provocan la oxidación de los lípidos. Además, en estas reacciones se originan otros productos secundarios - furanos, pirazinas, cetonas, aldehídos, pirroles, compuestos aromáticos y ácidos entre otros- que entran en contacto con la materia prima.

Atendiendo a la multitud de compuestos orgánicos que están presentes en las avellanas, la técnica de GC×GC resulta una alternativa analítica útil para la caracterización completa de la muestra investigada.

En este trabajo científico, una muestra de polvo de avellana (1 g) fue sometida a un método de preparación de muestra basado en microextracción con fibra capilar en espacio de cabeza (*headspace-solid phase microextraction*, HS-SPME) con el fin de pre-concentrar la fracción volátil de la muestra. Esta fracción aromática fue posteriormente inyectada en el GC×GC-ToF MS (10 min, 250 oC) para su análisis cromatográfico.

Una vez procesadas las muestras, el siguiente paso consistió en localizar y detectar peculiaridades analíticas en los cromatogramas a fin de asignar características propias a cada muestra. Estas características son: tiempos de retención relativos de los analitos, abundancias de compuestos mayoritarios o patrones de fragmentación de masas. De manera sencilla, un pico correctamente definido por su tiempo de elución, abundancia y espectro de masas sería una peculiaridad analítica propia de la muestra.

La comparación entre muestras se puede llevar a cabo de dos maneras: (i) por superposición de todos los cromatogramas de las muestras adquiridas y asignando regiones de coincidencia (el denominado *chromatographic fingerprinting*), o (ii) por creación de una plantilla individual a la cual se van añadiendo picos aislados (con su correspondiente tiempo de retención, espectro de masas y abundancia) para realizar una comparación entre muestras (*comprehensive template matching fingerprinting*). La segunda aproximación es más específica y selectiva puesto que se evitan problemas derivados de una incorrecta asignación de peculiaridades analíticas (pueden asignarse dos picos para una misma región de coincidencia o incluso un pico dividirse en dos regiones distintas) a la vez que permite la identificación de cada pico y su correspondiente asignación a su característica química (ejemplo: el feniletanol da su olor característico a la miel). Esta aproximación crea una plantilla consenso que se compara con cada cromatograma individual y se evalúa el grado de coincidencia entre ambos.

En este artículo se aplica la técnica de *fingerprinting* para la caracterización de muestras de avellana tostada procedentes de Italia y Turquía. En el artículo se observa como las distintas variedades de avellana dentro de un mismo país tienen perfiles característicos pero sus compuestos mayoritarios son iguales entre ellos y completamente distintos a los del otro país.

**“Automatic searching and evaluation of priority and emerging contaminants in wastewater and river water by stir bar sorptive extraction followed by comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry”**

*M.J. Gómez, S. Herrera, D. Solé, E. García-Calvo and A. Fernández-Alba*  
*Analytical Chemistry* 83 (2011) 2638-2647

En este trabajo se desarrolla un método basado en extracción por absorción sobre barra agitadora (SBSE) con posterior detección con GC×GC–ToF MS para la búsqueda automática y evaluación de contaminantes (semi-) y a-polares en muestras de agua. Se analizaron dos fuentes de agua: agua muestreada a lo largo del curso del río Henares (Comunidad de Madrid) y el efluente de una planta de tratamiento de aguas en Alcalá de Henares (Madrid). En ambos casos las muestras de agua fueron tratadas directamente sin filtración previa. Se extrajo el contenido volátil de las muestras de agua mediante extracción SBSE de 100 mL de la muestra. La inyección de la muestra en el equipo de GC×GC se llevó a cabo por desorción térmica.

Se realizó, en primer lugar, una optimización del método de GC×GC–ToF MS para la identificación y posterior cuantificación de 55 compuestos orgánicos, incluyendo 13 productos de cuidado personal, 15 PAHs y 27 pesticidas. Se construyeron rectas de calibrado para cada uno de estos analitos dentro del intervalo de concentración esperado para estos compuestos en muestras de agua. Una vez construidas las rectas, se procedió al análisis de dichos analitos en las muestras reales. El criterio de búsqueda quedó limitado por una ventana amplia de tiempo que incluía los tiempos de retención observados en el calibrado para cada compuesto y unos parámetros de procesado limitados por la relación señal/ruido del pico, la adquisición del espectro de masas en modo SCAN y una asignación de similitud con el espectro de referencia mayor del 60%. Con estos criterios de procesado, además de la cuantificación de los compuestos

“*target*”, fue posible identificar (pero no cuantificar) otros compuestos orgánicos “*non-target*” presentes en la muestra. Esto fue posible gracias a la alta sensibilidad y a la posibilidad de adquisición de espectros de masa en modo SCAN a lo largo de todo el cromatograma. Estos compuestos “*non-target*” fueron identificados en base a la similitud de sus espectros de masa con los de librerías de referencia de compuestos orgánicos. Se identificaron insecticidas, productos industriales, antioxidantes, productos farmacéuticos, antisépticos, drogas y productos de degradación, entre otros.

Por último, los autores valoraron la posibilidad de aplicación de la GC×GC–ToF MS para comparar perfiles cromatográficos de las aguas estudiadas. Como en el trabajo anterior, el objetivo era realizar análisis visuales o *fingerprinting* para caracterizar geográficamente las muestras de agua. Para ello se empleó la herramienta del GC×GC–ToF MS que permite dibujar en el *contour plot* burbujas proporcionales al área de cada pico cuantificado. De esta manera, se pueden identificar fácilmente las familias de compuestos que tienen una mayor incidencia en las muestras (se pueden colorear las bolas de diferente color según el grupo de compuestos que corresponda). Se trata de un análisis cualitativo, puesto que el área de las burbujas es proporcional al área del pico y esta depende de la sensibilidad del equipo para cada analito. Sin embargo, puede resultar muy útil para la evaluación de la variación geográfica de la contaminación de las muestras. De hecho, en este estudio se observó que la contaminación por compuestos orgánicos disminuía en aquellas muestras de agua que se situaban más alejadas de la planta de tratamiento de aguas.

**“Compound class oil fingerprinting techniques using comprehensive two-dimensional gas chromatography (GC×GC)”**

*G. Tood Ventura, B. Raghuraman, R.K. Nelson, O.C. Mullins, C.M. Reddy*  
*Organic Geochemistry* 41 (2010) 1026-1035

La caracterización de la composición de una muestra de petróleo es clave a la hora de determinar la posible conectividad entre zonas de producción de petróleo; es decir, la compartimentación de los reservorios de petróleo. Esta caracterización puede realizarse siguiendo diversas estrategias. La más común es perforar con una sonda el reservorio con el fin de determinar su capacidad y extensión. Sin embargo, esta técnica



puede resultar muy costosa cuando se trata de reservorios en zonas muy profundas. Posibles alternativas incluyen el análisis de gradientes de presiones o el de la composición de hidrocarburos en la muestra.

Los protocolos analíticos habitualmente empleados para abordar el análisis de hidrocarburos en petróleo pasan por un análisis de la muestra mediante GC-MS. Sin embargo, esta técnica no es capaz de realizar en un solo análisis una caracterización composicional completa del petróleo. El motivo es la gran cantidad de hidrocarburos aromáticos, saturados e insaturados, resinas y asfaltenos presentes en el petróleo. En este punto, la técnica de GC×GC resulta útil ya que permite eliminar esas restricciones analíticas mediante el acoplamiento de distintos mecanismos de separación cromatográficos. Este estudio presenta una metodología analítica basada en GC×GC para aplicar métodos de *fingerprinting* y comparar muestras de petróleo de distintos reservorios. El método se basa en la comparación de las abundancias de las distintas clases de compuestos orgánicos en las diferentes muestras de petróleo. Las muestras analizadas correspondían a petróleo extraído de dos reservorios distintos (180 km de distancia entre ambos) habiendo dos pares de muestras de cada uno de ellos.

Una vez las muestras fueron inyectadas en el equipo de GC×GC, se procedió a la clasificación por familias de compuestos en los cromatogramas bidimensionales. Los alquenos no fueron considerados en los métodos de *fingerprintings* ya que son contaminantes sintéticos procedentes de los lodos de perforación.

Se ensayaron tres aproximaciones para la comparación de la composición de hidrocarburos en las muestras: (i) comparación de biomarcadores que describan el estado de la materia orgánica, (ii) la comparación entre grupos de compuestos observados con

GC×GC, y (iii) la comparación por intervalos específicos de tiempos de elución relativos.

Si bien el ratio entre distintos biomarcadores es una opción ideal para comparar la fuente e historia térmica de los petróleos, esta aproximación no resultó eficaz para evaluar la similitud composicional entre muestras de petróleo.

La segunda aproximación comparó la suma de intensidades para las diferentes familias de compuestos presentes en la muestra. Se comprobó que los n-alcanos y los alcanos ramificados eran los compuestos mayoritarios en el petróleo y que las diferencias en las abundancias entre estas familias eran menores para aquellas muestras de petróleo procedentes de una misma fuente. Asimismo, al analizar un blanco de petróleo (denominado así al pertenecer a un reservorio de petróleo de una región totalmente distinta) se comprobó que su composición era totalmente diferente, con una proporción de contenido de parafinas mucho menor.

Por último, la tercera aproximación permitió introducir un método de *fingerprinting* basado en la comparación de las abundancias de cada clase de hidrocarburos según sus tiempos de elución. A pesar de que este método no ofrece una comparación cuantitativa por peso molecular, los resultados demostraron su capacidad para realizar análisis composicionales empíricos y para identificar pares de muestras de petróleo procedentes del mismo reservorio. Cabe destacar que para algunos compuestos que eluían a tiempos mayores (pirenos, fluorantenos) esta aproximación no resultó adecuada para la caracterización de las muestras.

**Miren Pena Abaurrea**

*Dpto. Análisis Instrumental y Química Ambiental  
Instituto de Química Orgánica General (CSIC)*



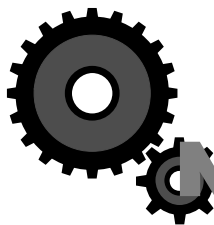
# EMPRESAS colaboradoras

## PROTECTORAS

- **AGILENT TECHNOLOGIES SPAIN, S.L.**  
Ctra. A-6, km 18,2  
28230 LAS ROZAS (Madrid)
- **BRUKER ESPAÑOLA, S.A.**  
Avda. Marie Curie, 5  
(Edificio Alfa – Pta. Baja)  
(Parque Empresarial Rivas Futura)  
28529 RIVAS-VACIAMADRID (Madrid)
- **PERKIN ELMER ESPAÑA, S.L.**  
Avda. de los Encuartes, 19  
28760 TRES CANTOS (Madrid)
- **SIGMA-ALDRICH QUÍMICA, S.A.**  
Ronda de Poniente, 3; 2ª Planta  
28760 TRES CANTOS (Madrid)
- **TEKNOKROMA**  
Camí de Can Calders, 14  
08173 SANT CUGAT DEL VALLÈS  
(Barcelona)
- **THERMO FISHER SCIENTIFIC**  
Valportillo I, 22 1ª Planta  
Edificio Caoba  
28108 ALCOBENDAS (Madrid)
- **WATERS CROMATOGRÀFIA, S.A.**  
Ronda Can Fatjó, 7-A  
Parc Tecnològic del Vallès  
08290 CERDANYOLA DEL VALLÈS  
(Barcelona)

## ASOCIADAS

- **AL AIR LIQUIDE ESPAÑA, S.A.**  
Paseo de la Castellana, 35  
28046 MADRID
- **GILSON INTERNATIONAL B.V.**  
Avda. de Castilla, 1 (N-II km 17)  
Polígono Empresarial San Fernando  
28830 SAN FERNANDO DE HENARES (Madrid)
- **GOMENSORO, S.A.**  
Aguacate, 15  
28044 MADRID  
Tlf. 915086586 vicente.ubeda@gomensoro.net
- **INGENIERÍA ANALÍTICA, S.L.**  
Avenida. Cerdanyola, 73, 3º izq.  
08172 SANT CUGAT DEL VALLÈS (Barcelona)
- **IZASA, S.A.**  
Aragoneses, 13  
Polígono Industrial Alcobendas  
28108 ALCOBENDAS (Madrid)
- **MICRÓN ANALÍTICA, S.A.**  
C/Rafael Bergamín, 16B  
28043 Madrid
- **MILLIPORE IBÉRICA, S.A.U.**  
Avenida de Burgos, 114  
28050 MADRID
- **SCHARLAB, S.L.**  
Gato Pérez, 33  
Polígono Industrial Mas D'en Cisa  
08181 SENTMENAT (Barcelona)
- **SERVICIO Y MANTENIMIENTO DE TÉCNICAS ANALÍTICAS (SYMTA, S.A.L.)**  
San Máximo, 31  
28041 MADRID
- **S.I.A. ENGINYERS, S.L.**  
Monturiol, 16, baixos  
08018 BARCELONA
- **SOCIEDAD ESPAÑOLA DE CARBUROS METÁLICOS**  
Plaza de Cronos, 5  
28037 MADRID
- **SUGELABOR**  
Sicilia, 36  
28038 MADRID
- **VERTEX TECHNICS, S.L.**  
Comercio, 12-14, bajos  
08902 HOSPITALET DE LLOBREGAT  
(Barcelona)
- **VWR INTERNATIONAL EUROLAB, S.L.**  
Calle de la Tecnología, 5-17  
A7 - Llinars Park  
08450 LLINARS DEL VALLÈS (Barcelona)



# NOVEDADES TÉCNICAS



Bruker Chemical Analysis

## MAXIS IMPACT. UNA NUEVA EVOLUCIÓN EN LAS PRESTACIONES DE LOS UHR-TOF

Bruker Daltonics ha presentado el nuevo espectrómetro de masas UHR-TOF Qq-TOF maxis Impact en la ASMS de este año 2011, ampliando nuestro abanico de espectrómetros de masas conjuntamente con las trampas de iones amaZon y los MALDI-TOF y TOF/TOF microflex, Autoflex Speed y UltrafleXtreme.

El maXis Impact complementa la serie de espectrómetros UHR-Qq-TOF conjuntamente con el maXis 4G, que proporcionan una alta velocidad de análisis sin pérdida de resolución ni de exactitud de masa, siendo estos espectrómetros de masas óptimos para trabajar con UHPLC. A su vez, su sensibilidad y el gran rango dinámico permiten su uso en cuantificación.

El nuevo maXis Impact es un equipo robusto de sobremesa que proporciona resoluciones de 40.000 FSR y una exactitud de masa de 1 ppm adquiriendo hasta 50 espectros por segundo. Lo que lo hace un equipo especialmente atractivo tanto para su uso tanto en screening de pesticidas, drogas de abuso o doping como en Proteómica por su excelente sensibilidad en MS/MS incluso en masas bajas que permite aumentar el número de identificaciones o bien para el análisis de proteínas enteras.

Gracias a su sensibilidad y rango dinámico, el maXis Impact es especialmente de ayuda en estudios de cuantificación mejorando en 50 veces la generación anterior de ESI-Q-TOF, especialmente en el rango de masas bajas en modo MS/MS que es importante para la confirmación de los analitos. Esta importante mejora en sensibilidad cambia el punto de vista sobre el screening de compuestos como en el caso de pesticidas. Con límites de detección habituales a nivel de sub-ng/mL, se consiguen excelentes MRL de manera fácil.

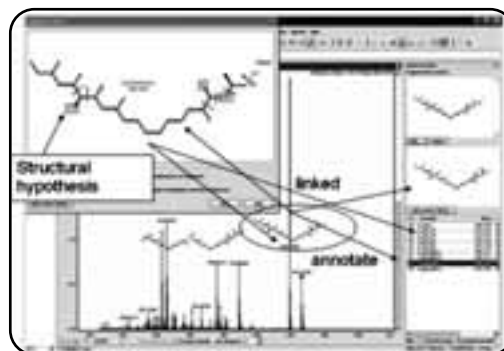
El maXis Impact es un equipo que permite realizar estudios cualitativos y cuantitativos en un solo análisis. La identificación de los compuestos se obtiene mediante la exactitud de masa tanto en MS como MS/MS, la utilización de la envoltura isotópica y el tiempo de retención en un software específico, mientras que los límites de

cuantificación están a nivel de sub-ng/mL con un rango dinámico de cuatro órdenes de magnitud.

Tomadas de manera conjunta, la capacidad para realizar análisis cuantitativos y cualitativos hacen del maXis Impact una excelente elección para el análisis de rutina en aplicaciones de screening con confirmación y cuantificación en la misma carrera cromatográfica con una excelente calidad de los resultados.

Por otro lado, Bruker Daltonics ha desarrollado a su vez nuevas herramientas de software de uso en sus equipos de alta resolución como, por ejemplo, la aplicación FragmentExplorer™. FragmentExplorer™ ha sido diseñado especialmente para una rápida interpretación de datos de MS/MS.

En un primer paso la fórmula empírica tanto del ion padre como de los iones fragmento se calcula automáticamente con el software SmartFormula 3D que utiliza tanto la exactitud de masa y las envolturas isotópicas tanto del espectro de MS como de MS/MS. Seguidamente, FragmentExplorer™ proporciona la información estructural del compuesto utilizando la información sobre los fragmentos que se obtiene con SmartFormula 3D. FragmentExplorer™ utiliza un programa de dibujo basado en ChemDraw™ (Figura 1).



**Figura 1.** Identificación de Myxalamida A mediante un espectro de MS/MS de alta resolución con el maXis impact combinando los resultados de SmartFormula 3D y FragmentExplorer para las asignaciones estructurales.

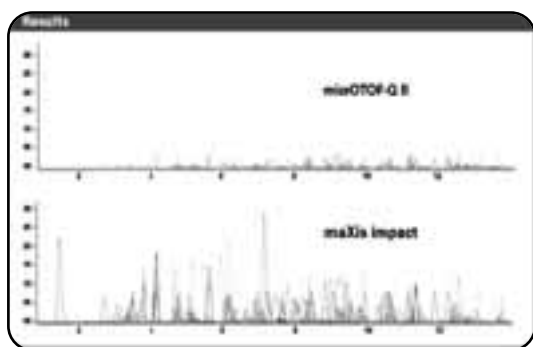
## EXPERIMENTAL

Una mezcla de 200 pesticidas se analizó mediante la aplicación PesticideScreening™. Esta misma muestra se ha caracterizado previamente y ha servido para comprobar la mejora de los resultados del maXis Impact en relación a la generación anterior de ESI-Q-TOF, especialmente en sensibilidad.

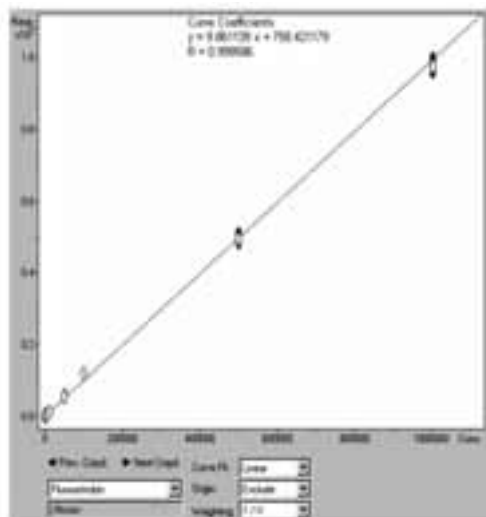
La aplicación PesticideScreening™ es un protocolo desarrollado que utiliza la masa exacta, la comparación de las envolturas isotópicas y los tiempos de retención para obtener un resultado directamente en una tabla de fácil interpretación.

## CONCLUSIONES

Se ha comprobado que la sensibilidad del maXis mejora de 20 a 50 veces la sensibilidad de los equipos anteriores en rutina (Figura 2). También se pudo comprobar la mejora en los límites de cuantificación y rango dinámico como puede observarse en la Figura 3. Alcanzando un límite de cuantificación de 50 fg para el Fluoxastrobin y un rango dinámico lineal hasta 1 ng.



**Figura 2.** Superposición de los cromatogramas de iones extraídos con alta resolución (hrEIC) mostrando la evolución en la sensibilidad del nuevo maXis impact.



**Figura 3.** Recta de calibrado de Fluoxastrobin desde 50 fg a 1 ng en columna.

Bruker Española S.A.  
www.bruker.com

# SIGMA-ALDRICH®

## SEPARACIONES QUIRALES.

### ¿SABE CÓMO EMPEZAR?

Supelco ofrece el más completo servicio de elección de sistema de separación quiral. Con 33 diferentes sistemas cromatográficos y 3 instrumentos trabajando simultáneamente en fase normal (NP), fase reversa (RP) y ciclofructanos.

Más del 94% de éxito en la separación de compuestos quirales debido a que se prueban los compuestos en 33 sistemas diferentes:

#### Evaluación en Fase Normal

- 15 combinaciones de columnas y fases móviles.
- Todas las fases móviles se usan a temperatura ambiente.

#### Evaluación en Fase Reversa

- 12 combinaciones de columnas y fases móviles.
- Fases móviles a 25° C

#### Evaluación en Fases Ciclofructan

- 6 combinaciones de columnas y fases móviles.
- Todas las fases móviles se usan a temperatura ambiente.

Consulte a nuestra red comercial por una **prueba** de nuestro sistema de evaluación y selección de la columna y método más apropiado para su separación quiral.

También disponemos de servicio de optimización de métodos, escalado y separaciones quirales a gran escala.

### ¿Tiene acreditación 17025?

### ¿Necesita ENSAYO INTERLABORATORIO?

La incorporación de RTC a nuestra amplia oferta de patrones y materiales de referencia ha traído también el servicio de muestras ciegas para la realización de ensayos interlaboratorios acordes a los requerimientos de la Norma ISO 17025. Solicite su copia del catálogo RTC y comuníquenos sus necesidades anuales de ofertas.

En el siguiente vínculo encontrará la más completa oferta de estándares analíticos, sofisticada herramienta de búsqueda, mezclas a medida y soluciones novedosas en estándares analíticos.

[www.sigmaldrich.com/standards](http://www.sigmaldrich.com/standards)

O consultar a nuestro Servicio Técnico:

Tel. 900 10 13 76

[serviciotecnico@sial.com](mailto:serviciotecnico@sial.com)



# Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

### WATERS PRESENTA EL SISTEMA UPLC CON MAYOR RENDIMIENTO: EL NUEVO SISTEMA ACQUITY UPLC I-CLASS

El nuevo sistema ACQUITY UPLC I-Class lleva la tecnología de separación a otro nivel, maximizando la capacidad de picos y ampliando el rendimiento de cualquier detector de MS.

La corporación Waters presenta el nuevo sistema Waters® ACQUITY UPLC® I-Class, el sistema UPLC® con mayor rendimiento diseñado hasta el momento y que lleva la tecnología de separación UltraPerformance LC® al siguiente nivel. Para los científicos retados con las separaciones más difíciles, el sistema ACQUITY UPLC® I-Class ofrece la menor dispersión y arrastre que existe en el mercado. La baja dispersión maximiza la capacidad de picos y en consecuencia mejora las separaciones cromatográficas y optimiza el rendimiento de cualquier espectrómetro de masas.



#### ACQUITY UPLC® I-Class de Waters

“Los descubrimientos con mayor potencial para mejorar nuestras vidas a menudo dependen de las muestras y componentes más difíciles de comprender. El sistema ACQUITY UPLC® I-Class se ha diseñado específicamente para el rápido ritmo de los laboratorios que están en la vanguardia de la investigación,” dijo Art Caputo, Presidente de Waters Division. “El diseño y el funcionamiento del I-Class están basados en la continua información recibida por parte de los clientes, que ha resultado en mejoras en la separación con diámetro de partícula inferior a 2 µm que sólo el creador de la tecnología puede aprovechar. Tanto si los clientes necesitan analizar de manera rápida compuestos en matrices complejas y de

volumen limitado, como si tratan de optimizar el rendimiento de cualquier espectrómetro de masas presente en el mercado, ACQUITY UPLC® I-Class permite a los científicos solucionar las separaciones más complejas y los retos de detección”.

El sistema ACQUITY UPLC® I-Class destaca en el análisis de compuestos complejos y con volumen de muestra limitado, manteniendo el ritmo de los laboratorios más avanzados. Los compuestos con volumen de muestra limitado incluyen fármacos de alta potencia, trazas de contaminación en alimentos o agua y productos bioterapéuticos avanzados. Estas muestras pueden representar retos de separación que requieren un sistema LC que pueda maximizar los beneficios de cromatografía con tamaño de partícula inferior a 2 µm para un mejor rendimiento y prestaciones en MS.

Entre las muchas innovaciones que se han incluido en el nuevo sistema ACQUITY UPLC® I-Class, la característica clave es un volumen de sistema mínimo. Esto reduce significativamente los niveles de dispersión, obteniendo una mejor resolución y una capacidad de picos superior. Una dispersión inferior y picos estrechos aumentan la sensibilidad de cualquier espectrómetro de masas. Además, una dispersión baja permite al usuario reducir los tiempos de adquisición sin afectar a la separación, ya que la resolución se mantiene incluso para gradientes de menos de un minuto. Por otro lado, el nuevo diseño y los nuevos materiales utilizados reducen drásticamente el arrastre del sistema, lo que incrementa la confianza del usuario en los resultados obtenidos.

El sistema ACQUITY UPLC® I-Class ofrece también una gran flexibilidad y la capacidad de una adquisición de muestra precisa. Dependiendo de las necesidades de la aplicación, los usuarios pueden utilizar el sistema de gestión de muestras con loop fijo, con una alta precisión y baja dispersión, o el primer sistema de gestión de muestras del mundo con volúmenes variables y baja dispersión con un diseño de la aguja incorporada al flujo (*flow-through needle*), que ofrece inyecciones de alta precisión, una recuperación de muestra excelente y un bajo arrastre del sistema optimizando los resultados incluso de los detectores de masas más sensibles.

#### Serie ACQUITY UPLC

Hace siete años, a través de la introducción de la tecnología UPLC, Waters fue pionera lanzando una nueva categoría de prestaciones cromatográficas con la comercialización de columnas de tamaño de partícula inferior a 2 µm, diseñadas junto con instrumentación y fluidica avanzadas para ofrecer un mayor rendimiento a altas presiones. La nueva tecnología resultó en mejoras signifi-



cantes en resolución y sensibilidad, aumentando a la vez la rapidez del análisis.

Hasta la fecha, Waters ha instalado miles de sistemas ACQUITY UPLC®, ha dado soporte a cerca de 900 artículos, ha demostrado la reducción en el consumo de disolventes de hasta el 95% y ha atendido las necesidades de agencias reguladoras de todo el mundo.

El sistema ACQUITY UPLC® I-Class se une a los sistemas ACQUITY UPLC H-Class, ACQUITY UPLC H-Class Bio, nanoACQUITY UPLC®, ACQUITY UPLC con tecnología 2D, nanoACQUITY UPLC con tecnología 2D, nanoACQUITY UPLC con tecnología HDX, PATROL UPLC® Process Analyzer, PATROL UPLC Laboratory Analyzer y UPLC con tecnología SPE On-line.

La adopción de la tecnología UPLC se ha acelerado mediante un diverso rango de sistemas basados en una plataforma común y probada. Esta tecnología beneficia a todo tipo de laboratorios. Ellos están en el centro de los negocios actuales, las necesidades académicas y reguladoras, asegurando que se cumplan los objetivos científicos, operacionales, la sostenibilidad y la rentabilidad.

Para más información sobre el sistema ACQUITY UPLC I-Class, visite [www.waters.com/iclass](http://www.waters.com/iclass)

#### Acerca de la corporación Waters ([www.waters.com](http://www.waters.com))

Durante más de 50 años, la corporación Waters (NYSE:WAT) ha contribuido al desarrollo de los laboratorios ofreciendo innovaciones prácticas y sostenibles que permiten avances significativos en áreas como la sanidad, la gestión medioambiental y la seguridad alimentaria a nivel mundial.

Gracias a una gama de productos pionera en técnicas de separación, gestión de información del laboratorio, espectrometría de masas y análisis térmico, Waters ofrece soluciones innovadoras que aseguran el éxito de sus clientes.

Con unos ingresos de 1.640 millones de dólares y 5.400 empleados, Waters impulsa el descubrimiento científico y la excelencia operativa para sus clientes de todo el mundo.

Waters, ACQUITY, UltraPerformance Liquid Chromatography, nanoACQUITY, PATROL y UPLC, son marcas comerciales de la corporación Waters.

Contacto  
Anna Farré (Responsable de marketing)  
+34 902 254 254  
[anna\\_farre@waters.com](mailto:anna_farre@waters.com)



#### INTERFASE CROMATOGRAFÍA EN CAPA FINA-ESPECTROMETRÍA DE MASAS (TLC-MS)

La interfase TLC-MS de Camag, líder mundial en cromatografía en capa fina, permite la extracción directa de compuestos desde la placa para su introducción en el espectrómetro de masas, eliminando la necesidad de raspar las placas y extraer con disolvente, permitiendo la identificación y elucidación de sustancias desconocidas. Encuentra aplicación en los campos de investigación, forense o medioambiental.

El instrumento extrae zonas circulares u ovaladas, empleando un disolvente adecuado que es impulsado por la bomba de HPLC. El posicionamiento de la cabeza de elución se realiza de forma semiautomática con la ayuda de un puntero láser que indica la posición de extracción. Después de la extracción, el eluato se transfiere directamente al espectrómetro de masas y la cabeza extractora se limpia de forma automática. Es posible realizar la extracción a partir de placas de vidrio o de aluminio, de hasta 20 x 20 cm.



Para más información, contactar con:  
IZASA, S.A.  
TEL.: 902 20 30 80  
[dac2@izasa.es](mailto:dac2@izasa.es)



## Phenomenex introduce la tecnología Core-Shell HPLC/UHPLC Aeris™ para proteínas y péptidos

Torrance, CA (1 Noviembre de 2011) – Phenomenex Inc., líder mundial en el desarrollo y fabricación de nuevas tecnologías en las ciencias de la separación, introduce Aeris™ – columnas Core-Shell de HPLC/UHPLC especialmente diseñadas para el análisis de proteínas y péptidos. Estas nuevas columnas de alto rendimiento ofrecen más resolución y capacidad de picos que otros rellenos de bioseparación, proporcionando resultados de sub-2 micras en cualquier sistema de LC. Con su sangrado prácticamente nulo, las columnas Aeris™ son totalmente compatibles con MS.

Las columnas Aeris™ están disponibles con tamaño de poro grande y pequeño. Las columnas Core-Shell Aeris™ WIDEPORE 3.6-micras están optimizadas para la separación de proteínas intactas y polipéptidos y están disponibles en tres selectividades – XB-C18, XB-C8 y C4. Como las partículas Core-Shell de 3.6-micras producen menor presión que los rellenos tradicionales, se pueden utilizar columnas más largas o columnas en serie para mejorar el poder de resolución tanto en equipos de HPLC como de UHPLC.

Las columnas Aeris™ PEPTIDE 3.6-micras y 1.7-micras, diseñadas con un tamaño de poro pequeño, están recomendadas para la separación de péptidos de bajo peso molecular y para el mapeo de péptidos. La novedosa fase estacionaria XB-C18 proporciona la selectividad ideal para resolver péptidos. Las partículas Aeris™ PEPTIDE de 3.6-micras proporcionan una altísima resolución a presiones compatibles tanto en equipos de HPLC como de UHPLC. En equipos de UHPLC, las partículas Aeris™ de 1.7 micras ofrecen más capacidad de picos que las columnas totalmente porosas de sub-2 micras.

“Las nuevas columnas Aeris están listas para utilizarlas siendo necesario únicamente un ligerísimo trabajo en la transferencia del método,” comenta Kari Kelly, jefa de producto de Phenomenex. “Con una optimización simple del método, los usuarios pueden conseguir incluso mejor

resolución y rendimiento y nuestro departamento de soporte PhenoLogix está disponible para ayudarle en su cambio a Aeris™.”

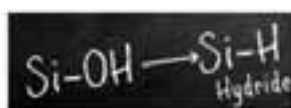
Phenomenex es un líder tecnológico mundial comprometido en el desarrollo de nuevas soluciones en química analítica que solventan los retos de purificación y separación de los investigadores de laboratorios privados, públicos, clínicos y académicos. Desde el descubrimiento de fármacos y desarrollo farmacéutico para el diagnóstico de enfermedades hasta la seguridad alimentaria pasando por los análisis medioambientales, las soluciones cromatográficas de Phenomenex avanzan la ciencia y ayudan a los investigadores a mejorar la salud y el bienestar mundial. Para más información visite [www.phenomenex.com](http://www.phenomenex.com).

Contacto:

Daniel López  
**Sales Manager**  
**679 97 77 31**  
**MICRON ANALITICA, S.A.**  
e-mail: [daniel.lopez@micron-analitica.com](mailto:daniel.lopez@micron-analitica.com)



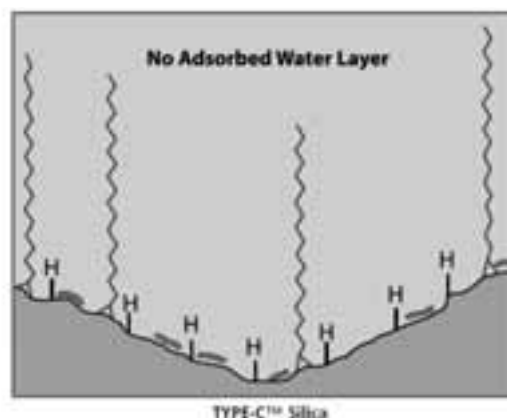
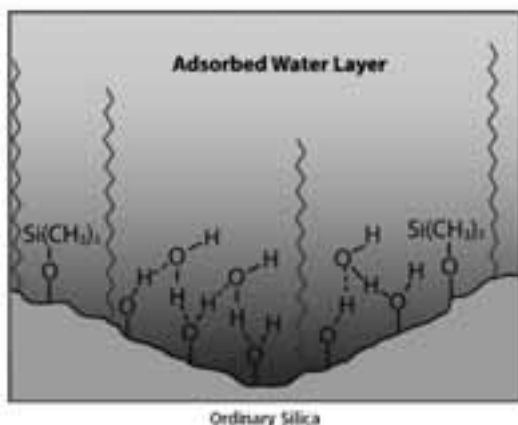
**¡¡POR FIN UNA TECNOLOGÍA QUE AHORRA TIEMPO Y DINERO!!**



Los rellenos C18-AR y C18-PFP son una muestra de los avances en el campo de las fases estacionarias ligadas en los últimos años.

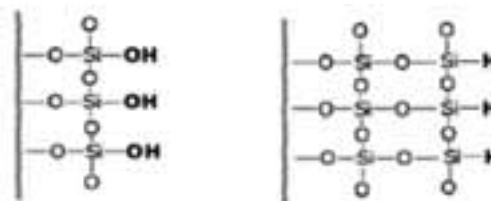
En el ámbito de la base de esa fase estacionaria, el desarrollo de sílicas de alta pureza también ha sido muy importante. Lejos quedan ya las partículas irregulares de sílica, que se perfeccionaron y dieron paso las partículas esféricas (sílica tipo A), cuyo desarrollo propició la aparición de la sílica de alta pureza, ultrainterte con la actividad silanólica minimizada (sílica tipo B) mediante el proceso de end-capping. A día de hoy es la tecnología de hidruro de silicio la que ofrece mayores avances en el campo de las sílicas empleadas en HPLC.

Bien es sabido que los grupos Si-OH residuales de la superficie de la sílica son los responsables de la actividad silanólica que provoca la asociación de la fase estacionaria con agua, creando una capa de hidratación, lo que propicia la aparición de colas ente otros efectos no deseables. Las columnas de sílica TIPO C™ están hechas con la misma sílice de las columnas habituales pero con enlaces Si-H en lugar de enlaces Si-OH, lo que origina que la capa de hidratación no sea constante lo que repercute a su vez beneficios cromatográficos (Fig. 1).



**Fig. 1**

El proceso patentado produce una superficie poblada en torno al 97 % con grupos de hidruros de silicio (Si-H), los cuales son muy estables. El “Type C Silica™” posee todas las ventajas de la sílica Tipo B como el formato esférico, el bajo contenido de metales, la alta fortaleza mecánica, reducida distribución y rangos muy escasos en el tamaño de los poros, es de fácil modificación química y no se hincha en presencia de solventes para lechos empacados estables. Permite trabajar con disolventes típicos de fase inversa, o de fase normal, incluso en la misma muestra se pueden analizar tanto analitos polares como apolares, o entre muestras se puede conseguir el reequilibrado en 5 minutos. (Fig. 2)



**Fig. 2. Estructura de la sílica habitual (izquierda) y la Tipo C™ (derecha).**

Con esta tecnología se han conseguido ligar fases tan clásicas y útiles como las C18, C8 y fenilo, y otras tan novedosas como las fases a base de colesterol.



**Fig. 3: Fase colesterol**

www.symta.com.  
 info@symta.com  
 San Máximo, 31, 4º nave 7. 28041 MADRID  
 Telf.: 91 500 20 60. Fax: 91 500 00 45

## NORMATIVA DE CONCESIÓN DE AYUDAS PARA LA ASISTENCIA A CONGRESOS Y/O REUNIONES

### CONDICIONES PARA LA CONCESIÓN DE AYUDAS PARA LA ASISTENCIA A CONGRESOS / REUNIONES DE CARÁCTER NACIONAL E INTERNACIONAL (aprobadas por la Junta de Gobierno de la SECyTA en sesión celebrada el 3 de Febrero de 2011)

#### **1. Requisitos generales para optar a una beca concedida por la SECyTA.**

- 1.1. Ser miembro de la SECyTA.
- 1.2. Encontrarse realizando la Tesis Doctoral o un Trabajo de Investigación de máster o equivalente en un Centro de Investigación.
- 1.3. No ser miembro de la plantilla laboral permanente del Centro de Investigación.

#### **2. Para asistencia a Reuniones de la SECyTA.**

- 2.1. Cláusula adicional a las anteriores: Se podrán conceder un máximo de 2 Becas por Investigador Senior (socio de la SECyTA) inscrito en la Reunión.
- 2.2. Sólo se podrá solicitar una ayuda por comunicación presentada en la Reunión y/o Congreso.

#### **3. Para asistencia a Reuniones Internacionales.**

- 3.1. Ser miembro de la SECyTA con una antigüedad superior a 1 año.
  - 3.2. Encontrarse realizando la Tesis Doctoral o Trabajo de Investigación de Máster o equivalente (como mínimo, en su segundo año) en un Centro de Investigación.
  - 3.3. No haber disfrutado de otra beca semejante concedida por la SECyTA durante la realización del Trabajo de Investigación.
  - 3.4. En el caso que el solicitante sea Doctor, no debe haber transcurrido más de dos años después de la obtención del título.
  - 3.5. Se establece la necesidad de que se trate de Congresos relacionados con el fin de la SECyTA o bien que la SECyTA figure como colaboradora o coorganizadora del Congreso.
  - 3.6. El Solicitante al que se le conceda la ayuda contrae la obligación de elaborar un informe (en español y en inglés) sobre el Congreso para su publicación en el Boletín y en la Página Web de la Sociedad. Si se conceden más de una beca para la asistencia un mismo congreso se podrá elaborar el informe de forma conjunta.
-

# IMPRESO DE SOLICITUD DE AYUDAS PARA ASISTENCIA A CONGRESOS NACIONALES O INTERNACIONALES

**DATOS PERSONALES DEL SOLICITANTE:**

Apellidos: \_\_\_\_\_ Nombre : \_\_\_\_\_

DNI o pasaporte: \_\_\_\_\_

**Dirección postal del Centro de Trabajo:**

Centro de Trabajo: \_\_\_\_\_

Calle o plaza: \_\_\_\_\_ n.º: \_\_\_\_\_ letra: \_\_\_\_\_

Localidad: \_\_\_\_\_ CP: \_\_\_\_\_ Provincia: \_\_\_\_\_

Teléfono: \_\_\_\_\_ Fax: \_\_\_\_\_

Correo electrónico: \_\_\_\_\_

**SOLICITA:**

AYUDA para asistencia al CONGRESO/REUNIÓN \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ organizado por \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_, que se celebra en \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ durante los días \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ del 20\_\_\_\_,

según las condiciones que figuran en el Anexo.

**DATOS DE LA COMUNICACIÓN QUE SE PRESENTA:**

Título: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_ Exposición Oral Exposición Cartel**OTRAS SUBVENCIONES:**

¿Se han solicitado otras ayudas para la asistencia al Congreso?

 SI Cite cuáles: \_\_\_\_\_ NO**DOCUMENTACIÓN QUE SE ADJUNTA:** Carta del Director de Tesis, Proyecto o del Grupo de Trabajo, certificando los puntos 1.1. a 1.3 del Anexo. Justificante de aceptación de la Comunicación que se presenta al Congreso. *Currículum Vitae* del solicitante. Otros que considera de interés (especificar): \_\_\_\_\_

En \_\_\_\_\_, \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de 20\_\_\_\_

**Si desea hacerse socio de la SECyTA rellene y envíe el siguiente boletín de inscripción, acompañado de la correspondiente autorización bancaria a:**

Dra. Belén Gómara  
Departamento de Análisis Instrumental y Química Ambiental  
Instituto de Química Orgánica General, CSIC  
Juan de la Cierva, 3  
28006-Madrid (Spain)  
Tel. 91-5618806 (ext. 385)  
Fax: 91-5644853  
e-mail: bgomara@iqog.csic.es

Cuota año 2011: 30 €

- Señale la casilla  correspondiente a la dirección en la que desea recibir la correspondencia.
- Puede efectuar el pago de la cuota del primer año mediante cheque bancario (adjuntándolo a esta solicitud) o mediante ingreso/transferencia a la Cuenta Corriente de "la Caixa" 2100/3739/11/2200059715 (Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines). Debe figurar en el ingreso o transferencia: "ALTA SECYTA + nombre y primer apellido del Socio"
- ¿Autoriza a incluir su correo electrónico en la página Web de la SECyTA?    SI    NO  
(Tache lo que NO proceda)

**SOCIEDAD ESPAÑOLA DE CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES**

**HOJA DE INSCRIPCION**

Apellidos ..... Nombre .....

DNI .....

Domicilio particular:

Calle ..... Núm. ....

Municipio ..... Provincia.....

Código postal .....

Teléfono ..... Correo electrónico .....

Industria u organización .....

.....

Calle ..... Núm. ....

Municipio ..... Provincia.....

Código postal .....

Teléfono ..... FAX ..... Correo electrónico .....

**DATOS BANCARIOS**

Banco/Caja de Ahorros .....

Sucursal .....

Dirección ..... Ciudad.....

D. ....

Con domicilio en .....

Y con cta. cte. / libreta de ahorro núm. / \_ \_ \_ \_ / \_ \_ \_ \_ / \_ \_ / \_ \_ \_ \_ \_ \_ \_ \_ /

Entidad    Oficina    D.C.    Número de cuenta

en esta Sucursal, ruega a usted se digne dar las órdenes oportunas para que con cargo a dicha cuenta sean abonados los recibos de mi cuota anual de socio que les serán presentados al cobro por la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines.

Atentamente le saluda,

En..... a.....de.....de 2012

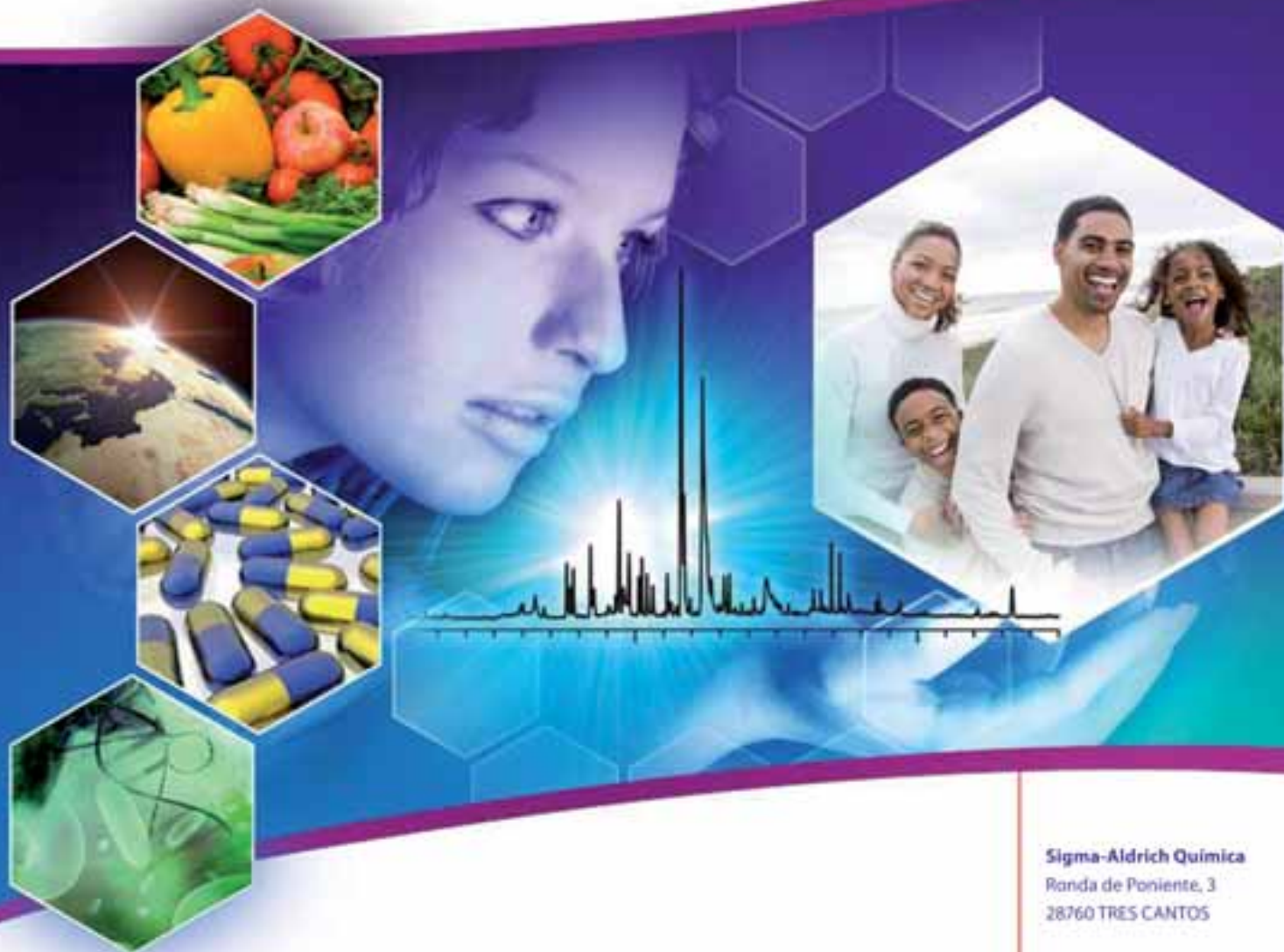
Firma:

# Productos Analítica / Sigma-Aldrich

 **SUPELCO**  
Analytical

 **Fluka**  
Analytical

Diseñados especialmente para sus Aplicaciones Analíticas



## Soportando todas sus necesidades de Análisis y Purificación

- Columnas/Accesorios HPLC
- Tubos/Cartuchos/Manifolds SPE
- Columnas/Rellenos Cromatografía Flash
- Reactivos Analítica
- Columnas/Liners/Purificadores en GC
- Fibras/Soportes SPME
- Estándares Químicos
- Productos para Valoraciones

Más información, llamando al **900 101 376 / 91 657 20 65**  
o visitando en [sigma-aldrich.com/analytical](http://sigma-aldrich.com/analytical)

Sigma-Aldrich Química  
Ronda de Poniente, 3  
28760 TRES CANTOS





**LO QUE LE SEPARA A USTED  
DE TODOS LOS DEMÁS.**



**Waters presenta el sistema ACQUITY UPLC I-Class**

Waters ha creado el sistema de UPLC® de mayor eficiencia jamás diseñado, mejorando de manera significativa la eficiencia cromatográfica, dándole más confianza en sus resultados y permitiendo tener la mayor sensibilidad de su espectrómetro de masas. Para los científicos que necesitan respuestas a sus desafíos más complicados, el ACQUITY UPLC® I-Class representa una oportunidad. Para más información visite [waters.com/iclass](http://waters.com/iclass)

Escanee el código QR con su smartphone para acceder a contenido exclusivo.

©2011 Waters Corporation. Waters, UPLC y ACQUITY UPLC son marcas registradas de Waters Corporation. The Science of What's Possible es una marca comercial de Waters Corporation.

**Waters**  
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™