

CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

SECYTA

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE
CROMATOGRAFÍA
Y TÉCNICAS AFINES

40
BOLETÍN DE LA SECYTA
VOLUMEN 40 NÚM. 2 (2019)
WWW.SECYTA.ORG

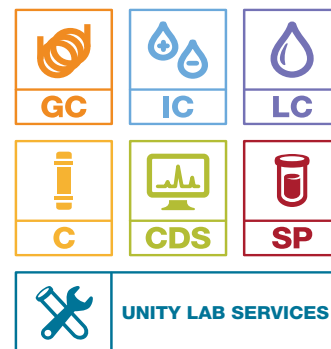


El poder colectivo de la cromatografía

Un CDS para hacerlo todo

Desde la estación de trabajo hasta el despliegue global, Thermo Scientific™ Chromeleon™, sistema de datos de cromatografía (CDS) se adapta perfectamente a cualquier negocio, desde la investigación, pasando por el desarrollo, hasta el control de calidad. Chromeleon CDS ofrece una mejor productividad, cumplimiento directo y una unificación única de flujos de trabajo para el análisis de cromatografía y espectrometría de masas.

Es un software listo para el sistema cloud que lo hace todo, respaldado por un equipo de producto dedicado a mantenerle un paso adelante para los próximos cambios normativos o de mercado. Con el mayor portafolio de soluciones de cromatografía, seguimos siendo un socio firme y comprometido en su esfuerzo por mejorar el mundo que nos rodea.



Para más información thermofisher.com/chromatography

ThermoFisher
SCIENTIFIC

CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

Madrid, 2019, Vol. 40, núm. 2
ISSN 1132-1369

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

ÍNDICE

58 EDITORIAL

NOTICIAS DE LA SECyTA

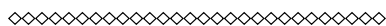
- 59 XIX Reunión Científica de la SECyTA (48ª Reunión Científica del GCTA)
60 XV Edición de los Premios "José Antonio García Domínguez"
63 19ª Asamblea General de la SECyTA
72 Nuevos socios
73 Junta de Gobierno de la SECyTA (2019)
74 Homenaje a socios
76 Estadísticas de funcionamiento de la Web de la SECyTA (2019)

INFORMACIONES

- 78 Congresos celebrados
83 Calendario de actividades
84 Nuevas tesis doctorales
88 Información bibliográfica

DE NUESTRAS EMPRESAS COLABORADORAS

- 92 Notas técnicas
110 Novedades técnicas



Redacción: Mario Fernández (mario@iqog.csic.es)
Ana Isabel Ruiz Matute (ana.ruiz@csic.es)
María Luz Sanz (mlsanz@iqog.csic.es)
Ana Cristina Soria Monzón (acsoria@iqog.csic.es)
Instituto de Química Orgánica General (CSIC)
Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid. Tel.91-562 2900

Publicidad: Mario Fernández (mario@iqog.csic.es)
Instituto de Química Orgánica General (CSIC)
Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid. Tel.91-562 2900

Depósito legal: M-1902-1975

Diseño y preimpresión: Gráficas Blanco, S. L.

Impresión: Solana e hijos Artes Gráficas, S. A. U.

Diseño de la portada: Pau de Riba

Los autores son responsables del contenido de sus artículos

EDITORIAL

Queridos socios de la SECyTA,

Como ya sabéis, el pasado mes de octubre se celebró en Santiago de Compostela el 1st Iberian Meeting in Separation Science and Mass Spectrometry, como fruto del acuerdo de colaboración entre la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM), el Grupo de Espectrometría de Masas de la Sociedad Portuguesa de Química y la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA). Un año más queríamos celebrar con vosotros el éxito de este congreso en cuyo marco tuvo lugar la XIX Reunión Científica de nuestra Sociedad (XLVIII Reunión del GCTA). Este éxito se lo debemos a la magnífica organización de las Dras. Marta Lores Aguín y Carmen García Jares, así como de todo su grupo de investigación, que nos han ofrecido un programa científico atractivo y de calidad junto a un excelente programa social que nos ha permitido disfrutar de la ciudad de Santiago de Compostela. Como en ediciones anteriores, la reunión contó con una elevada participación (cerca de 200 asistentes) y un excelente nivel, tanto por la calidad de las comunicaciones presentadas como por el interés de las temáticas tratadas en las conferencias plenarias, impartidas por investigadores de reconocido prestigio. Todo ello con la inestimable y elevada participación de las casas comerciales.

En dicha reunión, tuvo lugar la XIX Asamblea General de nuestra Sociedad en la que se procedió a la renovación parcial de la Junta de Gobierno, entre los cuales se encontraban los cargos de Presidente, Vicepresidente, Secretario y diversos vocales. Queríamos, por tanto, agradecer la participación de los socios y dar la bienvenida a los nuevos miembros de la Junta, el Dr. Mario Fernández y la Dra. Elena González, así como agradecer a los miembros salientes, la Dra. Elena Ibáñez y el Dr. Francisco Javier Moreno, el inestimable trabajo y dedicación a la SECyTA y su compromiso durante todos estos años en los que han formado parte de la Junta. Es hora, por tanto, de hacer balance de los últimos cuatro años de gestión de la SECyTA. Durante este periodo, las principales líneas de actuación de la Sociedad se han centrado en potenciar todas las iniciativas encaminadas a promover el uso de la Cromatografía y sus técnicas afines, promover actividades que fomenten la colaboración y el intercambio de conocimientos y experiencias entre investigadores pertenecientes a diversos campos de la Química, y reforzar y potenciar la política de becas para facilitar la asistencia de nuestros jóvenes investigadores, tanto a nuestras reuniones científicas como a las relacionadas con los fines de la Sociedad. Desde la Junta, nuestra intención es continuar con la labor realizada hasta el momento, intentando canalizar vuestras propuestas, promover actividades a nivel nacional e internacional, mejorar la calidad científica de nuestras reuniones e incrementar su participación, así como mantener y potenciar la política de becas. En este sentido, el esfuerzo económico de la Sociedad durante estos últimos años ha sido muy importante y creemos que se debe seguir manteniendo este compromiso para ayudar a la difusión de la investigación realizada por nuestros jóvenes asociados y contribuir, en la medida de lo posible, a su formación como futuros especialistas en técnicas separativas. Otro de los aspectos en los que se ha incidido ha sido la mejora y dinamización del Boletín de la Sociedad y de nuestra Web, como vehículos de difusión y visibilidad de nuestras actividades y como punto de referencia para los profesionales e investigadores que trabajan habitualmente con las técnicas cromatográficas y afines. Además, desde la Junta se ha intentado potenciar la participación e implicación de las casas comerciales en nuestras reuniones, aumentando tanto el número como el grado de colaboración. Por último, y no por ello menos importante, la colaboración de la SECyTA con otras Sociedades que comparten intereses comunes se ha intentado fortalecer y mejorar, participando conjuntamente en diferentes reuniones y eventos.

Para finalizar, os animamos a participar en la XX Reunión Científica de la SECyTA (XLIX Reunión del GCTA), que se celebrará en Almería a principios de octubre de 2020 y cuya organización correrá a cargo de la Dra. Ana Agüera, miembro de la SECyTA y antigua vocal de la Junta. Por nuestra parte, la actual Junta trabajará junto con los organizadores de la Reunión para preparar un programa científico atractivo y de calidad, a la altura de vuestras expectativas. Por tanto, os animamos a participar en nuestra próxima reunión y estamos convencidos de que entre todos conseguiremos que sea un éxito tanto de participación como a nivel científico.

FRANCISCO JAVIER SANTOS VICENTE y ANA MARÍA GARCÍA CAMPAÑA
Presidentes saliente y entrante de la SECyTA

NOTICIAS DE LA SECyTA

XIX REUNIÓN DE LA SECyTA (48ª REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

La celebración de la XIX reunión científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) tuvo lugar entre el 8 y el 11 de octubre de 2019, en la Facultad de Medicina de Santiago de Compostela, siendo las Dras. Carmen García Jares y Marta Lores Aguín las presidentas del evento. La reunión de nuestra Sociedad se realizó esta vez en el marco del First Iberian Meeting in Separation Science and Mass Spectrometry que fue organizado de forma conjunta con la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM) y el Grupo de Espectrometría de Masas de la Sociedad Portuguesa de Química (SPQ).

El programa científico destacó por su multidisciplinariedad y gran calidad, presentando como hilo conductor los últimos avances sobre el desarrollo de las técnicas y metodologías analíticas separativas para aplicaciones en biomedicina, medio ambiente y alimentación, entre otras. El programa incluyó siete conferencias plenarias impartidas por investigadores de gran prestigio internacional. **Adrian Covaci**, de la University of Antwerp (Bélgica), fue el encargado de impartir la conferencia inaugural del evento y dio una visión sobre las últimas tendencias en espectrometría de masas para la biomonitorización humana y la exposómica. La segunda conferencia plenaria corrió a cargo de **Rosario Pereiro** de la Universidad de Oviedo y llevó por título "Laser ablation ICP-MS for simultaneous quantitative imaging of elements and biomolecules in biological studies: achievements and trends". El segundo día, **Valérie Gabelica**, del National Institute of Health and Medical Research (Inserm, Francia), habló sobre los principios de separación de la espectrometría de movilidad iónica y sus aplicaciones para la caracterización estructural del ADN. Esa misma mañana, **Jane Thomas-Oates**, de la University of York (UK), impartió una interesante conferencia titulada "Alternative chromatographic and mass spectrometric approaches to metabolomic challenges". El jueves 10 de octubre **Frantisek Svec**, de la University Hradec Kralove (República Checa), abrió la sesión del día con una conferencia sobre las numerosas aplicaciones de los materiales monolíticos poliméricos porosos y, posteriormente, **Miguel Herrero** del CIAL-CSIC nos mostró las múltiples e interesantes aplicaciones de la cromatografía de líquidos bidimensional completa en el campo de la alimentación. La última conferencia plenaria titulada "Unveiling the secrets of the past using hyphenated chromatographic techniques" corrió a cargo de **Cristi-**

na Barrocas Dias de la University of Évora (Portugal). La conferencia de clausura del evento fue impartida por **Joan Grimalt**, del IDAEA-CSIC, y versó sobre la forma de medir el tiempo con la tabla periódica de los elementos químicos, haciendo un guiño así a la conmemoración del 150º aniversario de la creación de dicha tabla.

Además, durante el congreso se impartieron diversas comunicaciones orales, sesiones especiales dedicadas a jóvenes investigadores, sesiones de posters, así como comunicaciones flash de posters previamente seleccionados por el Comité Científico. La reunión estuvo también acompañada por una exposición comercial donde se presentaron novedades en instrumentación analítica y se impartieron seminarios y conferencias por parte de algunas de las empresas asociadas y protectoras.

La Asamblea General de la SECyTA se celebró el día 9 a última hora de la tarde, concediéndose las becas y ayudas de viajes a los jóvenes investigadores y celebrándose elecciones de la Junta de Gobierno de nuestra sociedad, en las que se renovaron los cargos de presidente, vicepresidentes, secretario y 7 vocales. También la recién nombrada presidenta de nuestra Sociedad, Ana María García Campaña, presentó la sede de la próxima reunión científica de la SECyTA, que tendrá lugar en Almería, bajo la coordinación de la Dra. Ana Agüera.

Durante la ceremonia de clausura de la reunión el día 11, se concedieron los "Premios José Antonio García Domínguez" (edición XV) a las mejores comunicaciones orales y en formato poster de jóvenes investigadores patrocinados por Bruker.

Es de destacar también la magnífica ubicación del evento y el atractivo programa social que nos tenía preparado el Comité Organizador, que nos permitieron disfrutar de la ciudad de Santiago de Compostela en su máximo esplendor.

Por último, felicitar al Comité Organizador y Científico, y en especial a las Dras. Carmen García Jares y Marta Lores Aguín, que, con su entusiasmo, esfuerzo y dedicación, permitieron que esta Reunión Científica de la SECyTA fuera todo un éxito.

MARÍA LUZ SANZ

Instituto de Química Orgánica General del CSIC

XV EDICIÓN PREMIOS "JOSÉ ANTONIO GARCÍA DOMÍNGUEZ"

En el marco de la XIX Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) celebrada en Santiago de Compostela del 8 al 11 de octubre de 2019 se otorgaron los premios José Antonio García Domínguez a las mejores comunicaciones orales y tipo cartel presentadas en dicha reunión. Al igual que en años anteriores, esta XV edición de los premios ha sido patrocinada por Bruker. Tras debatir los méritos científicos de las presentaciones, los jurados encargados de fallar los premios, tomaron por unanimidad los siguientes acuerdos:

1^{er} Premio a la mejor Comunicación Oral (800 euros)

Comunicación: OY-20

Título: POTENTIAL OF MICRO-LIQUID CHROMATOGRAPHY FOR THE DETERMINATION OF PSYCHOACTIVE SUBSTANCES IN WASTEWATER

Autores: *Alberto Celma*^{1*}, *Juan V. Sancho*¹, *Noelia Salgueiro-González*², *Sara Castiglioni*², *Ettore Zuccato*², *Félix Hernández*¹, *Lubertus Bijlsma*¹.

¹ *Research Institute for Pesticides and Water, University Jaume I, E-12071 Castelló, Spain.*

² *Istituto di Ricerche Farmacologiche Mario Negri - IRCCS, Dep. of Environmental Health Science, I-20156 Milan, Italy.*

2^o Premio a la mejor Comunicación Oral (600 euros)

Comunicación: OY-19

Título: ATMOSPHERIC PRESSURE PHOTOIONIZATION FOR GC-HRMS ANALYSIS OF PCDD/FS AND DIOXIN-LIKE PCBS IN FOOD AND ENVIRONMENTAL SAMPLES

Autores: *J. F. Ayala-Cabrera*^{1*}, *M. Ábalos*², *E. Abad*², *E. Moyano*¹, *F. J. Santos*¹

¹ *Department of Chemical Engineering and Analytical Chemistry, University of Barcelona, E-08028 Barcelona, Spain.*

² *Laboratory of Dioxins, Institute of Environmental Assessment and Water Research (IDAEA-CSIC), E-08034 Barcelona, Spain.*

1^{er} Premio al mejor Póster (400 euros)

Comunicación: P-104

Título: A NOVEL METHOD TO DETERMINE FIPRONIL AND FIPRONIL SULFONE IN EGGS BY CAPILLARY ELEC-

TROPHORESIS AND SALTING-OUT ASSISTED LIQUID-LIQUID EXTRACTION

Autores: *M. Mar Aparicio-Muriana*^{1*}, *Ivona Lhotská*², *Francisco J. Lara*¹ and *Ana M. García-Campaña*¹

¹ *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Granada, Av. Fuente Nueva s/n, E-18071, Granada, Spain.*

² *Charles University, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové, Prague, Czech Republic.*

2^o Premio al mejor Póster (300 euros)

Comunicación: P-69

Título: STUDY OF THE PHOTODEGRADATION OF PBDES IN WATER BY UV-LED TECHNOLOGY

Autores: *Meritxell Valentí*^{1*}, *Rafael González-Olmos*², *Jordi Díaz-Ferrero*¹

¹ *Environmental Laboratory;* ² *Chemical Engineering Department, IQS, Ramon Llull University, Via Augusta 390, 08017 Barcelona, Spain.*

La entrega de los premios tuvo lugar el 11 de octubre de 2019, durante la ceremonia de clausura de la XIX Reunión Científica de la SECyTA.

JUAN VICENTE SANCHO
Secretario de la SECyTA

1^{er} Premio a la mejor Comunicación Oral

POTENTIAL OF MICRO-LIQUID CHROMATOGRAPHY FOR THE DETERMINATION OF PSYCHOACTIVE SUBSTANCES IN WASTEWATER

A. Celma, J. V. Sancho, N. Salgueiro-González, S. Castiglioni, E. Zuccato, F. Hernández, L. Bijlsma

Wastewater-based epidemiology (WBE) can give valuable information on the extent and actual use of new psychoactive substances (NPS) and illicit drugs. Solid-phase extraction followed by UHPLC-MS/MS is normally used for the determination of both illicit drugs and NPS in wastewater. However, recently developed micro liquid chromatographic techniques (μ LC) remained unexplored in this field. The reduced flow rate used in μ LC techniques not only enhances the chro-

matographic performance because of the higher ionization efficiency, but it also reduces the amount of organic solvents required for the analysis moving μ LC a step forward into a greener analytical chemistry. In this study, a detailed comparison of μ LC and UHPLC, both coupled to tandem mass spectrometry, in terms of sensitivity and reproducibility has been made in the application field of WBE. As expected, a significant increase was observed for sensitivity when comparing mass normalized data (average 14-fold). Also, the overall method performance resulted in an average increase sensitivity factor of 4.5 for μ LC-MS/MS. This is of particular interest for this type of analysis where the presence of NPS and illicit drugs is usually at very low concentrations. However, large deviations in retention time (up to 0.4 min) affected the reproducibility and robustness of the methodology when it was applied to wastewater analysis. Since many of the NPS do not have its isotopically labelled standard, the utilization of retention time as an identification parameter in this study becomes essential. Therefore, further developments need to be accomplished in order to achieve a retention time reproducibility enough to validate the methodology. Although in this work μ LC-MS/MS was strongly influenced by the amount of matrix loaded in the separation device, its enhanced sensitivity and promotion of green chemistry (faster analysis time and less solvent consumption) allow to expect improved future applications, especially when analytes are present at very low concentrations.

2º Premio a la mejor Comunicación Oral

ATMOSPHERIC PRESSURE PHOTOIONIZATION FOR GC-HRMS ANALYSIS OF PCDD/FS AND DIOXIN-LIKE PCBs IN FOOD AND ENVIRONMENTAL SAMPLES

J. F. Ayala-Cabrera, M. Ábalos, E. Abad, E. Moyano, F. J. Santos

Polychlorinated dibenzo-*p*-dioxins (PCDDs), dibenzofurans (PCDFs) and dioxin-like polychlorinated biphenyls (dl-PCBs) involve a wide group organic pollutants of great concern due to their high toxicity and persistence in the environment. Although in the last decades their emissions have been reduced significantly due to the application of stricter environmental regulations^[1], their presence in the environment continues to be the subject of large-scale monitoring programs to guarantee the health of human being and living

organisms. Currently, gas chromatography coupled to high-resolution mass spectrometry is the technique of choice for the determination of the target compounds because it provides the required sensitivity and selectivity^[2], assuring the quality of the results^[3]. Recently, the use of the atmospheric pressure chemical ionization (APCI) in the GC-MS determination of environmental pollutants has shown to be a promising alternative to classical ionization techniques, but information about the real capability of the atmospheric pressure photoionization (APPI) is still limited.

In this work, a GC-APPI-HRMS (Orbitrap) method has been developed for the determination of PCDD/Fs and dl-PCBs in food and environmental samples. For this purpose, the APPI operating conditions and the use of different dopants were evaluated achieving the best results in the negative-ion mode using benzene for PCDD/Fs and diethyl ether for dl-PCBs. The developed method has been validated using certified reference materials and selected samples containing a wide range of concentration levels. The results have been compared with the reference GC-HRMS method demonstrating the good performance of the GC-APPI-HRMS method.

1er Premio al mejor Póster

A NOVEL METHOD TO DETERMINE FIPRONIL AND FIPRONIL SULFONE IN EGGS BY CAPILLARY ELECTROPHORESIS AND SALTING-OUT ASSISTED LIQUID-LIQUID EXTRACTION

M. M. Aparicio-Muriana, I. Lhotská, F. J. Lara, A. M. García-Campaña

Fipronil is an insecticide that has been prohibited in food-producing animals. However, in 2017, it was involved in a European health alert due to its presence in fresh hen eggs because of an illegal use as a veterinary treatment. EU has set maximum residue limits in eggs as the sum of fipronil and its main metabolite, fipronil sulfone ($5 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$), so it is crucial to monitor them in these matrixes. Previous methods were restricted to liquid and gas chromatography. In the present study, we have developed the first methodology for the separation of fipronil and two metabolites, fipronil-sulfide and fipronil-sulfone by capillary electrophoresis (CE) with UV-detection. Different electrophoretic modes were evaluated. Micellar electrokinetic

^[1] M. Van den Berg, L.S. Birnbaum, et al., *Toxicol. Sci.* 93, 223 (2006).

^[2] K.L. Organtini, L. Haimovici, et al., *Anal. Chem.* 87, 7902 (2015).

^[3] E. Reiner, *J. Mass Spectrom. Rev.* 29, 526 (2009).

chromatography (MEKC) was eventually selected, using as background electrolyte a solution of 50 mM ammonium perfluorooctanoate pH 9.0 with 10 % (v/v) methanol. The proposed method was combined with a simple sample treatment based on salting-out assisted liquid-liquid extraction (SALLE). Acetonitrile and ammonium sulfate were the extraction solvent and the salt selected for the determination of these compounds in eggs. However, an endogenous interferent peak did not allow fipronil-sulfide quantification using this extraction procedure but it was not a problem in the case of fipronil and fipronil sulfone. Validation parameters were investigated yielding satisfactory results. Precision, expressed as relative standard deviation, was below 14 % and recoveries ranged from 83 to 88 %. Limits of detection were $90 \mu\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ for fipronil and $150 \mu\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ for fipronil-sulfone. In terms of sensitivity, when intended for regulatory purposes, a sample treatment allowing extra preconcentration or more sensitive detectors, such as mass spectrometry (MS), would be needed in further works.

2º Premio al mejor Póster

STUDY OF THE PHOTODEGRADATION OF PBDES IN WATER BY UV-LED TECHNOLOGY

M. Valentí, R. González-Olmos, J. Díaz-Ferrero

Polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) have been one of the most employed family of flame retardants and are considered as persistent organic pollutants. For that reason, this project assesses the photodegradation of PBDEs in water samples applying advanced oxidation processes (AOPs). The combination of AOPs and

UV-LED radiation can be an effective treatment against a wide range of macropollutants, microorganisms and micropollutants such as phenols, pesticides or pharmaceuticals. To study the photodegradation of PBDEs in water samples, irradiation was applied using the Pearl-Beam T255/265/285 device, which provides three different wavelengths: 255 nm, 265 nm and 285 nm. First set of experiments were performed with spiked purified water samples in order to determine the best degradation conditions (wavelength, time). Then, the optimized methodology was applied to real water samples from different sources: superficial continental, marine, influent and effluent samples from two different wastewater treatment plants and a greywater sample.

For the analyses of both spiked and real samples, three consecutive LLE extractions of the samples were performed with hexane and followed by two purification columns: an anhydrous sulphate column and an acidic silica column. Extracts were concentrated to 25 μl and the analyses were performed by GC-HRMS. Best PBDE degradation results studied in spiked samples were achieved after irradiating samples at 285 nm during 240 min, reaching degradations from 50 to 87 % for all the congeners. Moreover, results of the repeatability studies pointed out that main contribution of the whole process variability came from the irradiation step ($18 \% < \text{RSD} < 50 \%$) in comparison to the analytical contribution ($3 \% < \text{RSD} < 10 \%$). Real water samples were spiked and exposed to 4 hours of irradiation at 285 nm. Successful photodegradation of PBDEs ranging 51 % to 97 % was achieved for all the PBDE congeners in the different water samples with the exception of the coastal one, in which only a 31 % of degradation was achieved.

NOTA DEL COMITÉ EDITORIAL

Como os comunicamos en la última Asamblea de la SECyTA, el Comité Editorial del Boletín ha experimentado algunos cambios entre sus miembros. Despedimos a Javier Moreno Andújar y damos la bienvenida a Ana Isabel Ruiz Matute, socia de la SECyTA y perteneciente al Instituto de Química Orgánica General (CSIC). Desde estas páginas hacemos llegar a Javier nuestro agradecimiento por los servicios prestados y por todos estos años de trabajo conjunto. Estamos seguros de que seguiremos contando con su apoyo. Dar también la bienvenida a Ana Isabel, quien seguro aportará nuevas y enriquecedoras propuestas a nuestra revista.

19ª ASAMBLEA GENERAL DE LA SECyTA

La 19ª Asamblea General de la SECyTA, que contó con la asistencia de 79 socios, se celebró el día 9 de octubre de 2019, a las 17:30 h, en el Salón de Actos de la Facultad de Medicina de la Universidad de Santiago de Compostela 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 del Tesorero.
5. Elecciones a la Junta de Gobierno.
6. Ruegos y preguntas.

DESARROLLO DE LA SESIÓN Y ACUERDOS ADOPTADOS

En primer lugar, el Presidente da la bienvenida a todos los asistentes a la 19ª Asamblea General de la SECyTA y expresa su más sincero agradecimiento a los miembros de los Comités Científico y Organizador del 1st Iberian Meeting in Separation Sciences and Mass Spectrometry por el excelente trabajo realizado.

1. Lectura y aprobación del acta de la Reunión anterior

El presidente indica a los asistentes que el borrador del Acta de la 18ª Asamblea General de la SECyTA celebrada el año pasado en Granada se puso a disposición de todos los socios para que pudiera ser consultada en la web de la SECyTA. En este momento el Presidente pregunta si alguno de los asistentes quiere hacer alguna modificación al Acta o si algún socio quiere que se lea el Acta en su totalidad. Al no haber ninguna intervención por parte de los socios presentes, se procede a aprobar el Acta de la 18ª Asamblea General de la SECyTA.

Antes de continuar con el punto 2 del orden del día, el Presidente solicita a los socios asistentes que se adelante el punto 5º, "Elecciones de la Junta de Gobierno", de forma que se pueda realizar la votación durante el transcurso de la Asamblea.

5. Elecciones a la Junta de Gobierno

El presidente indica a los asistentes que los miembros de la Junta de Gobierno que cesan en sus cargos de

acuerdo con los Estatutos de la Sociedad son los siguientes: Presidente (Francisco Javier Santos), Vicepresidente (Joan Grimalt), Secretario (Juan Vicente Sancho), 7 vocales (Begoña Jiménez, Belén Gómara, Marta Lores, Javier Moreno, Elena Ibáñez, José M. Sangeris y José Monge) y, por renuncia de su cargo un vicepresidente (Ana María García Campaña).

El calendario aprobado por la Junta de Gobierno de la SECyTA el 11 de julio de 2019 y enviado a los socios para proceder a la renovación de los cargos fue el siguiente:

- 12 de julio de 2019: Envío de la convocatoria de elecciones por carta a los socios de la SECyTA e inicio del periodo de presentación de las candidaturas.
- 2 de septiembre de 2019: Fecha límite para la presentación de candidaturas.
- 3 de septiembre de 2019: Comunicación al Presidente y a los miembros de la Junta de Gobierno de los candidatos presentados.
- 4 de septiembre de 2019: Comunicación pública a los socios de la SECyTA de los candidatos presentados y de la normativa para emitir el voto por correo. Inicio del período de votación por correo.
- 4 de octubre de 2019: Fecha límite de aceptación de votos por correo.
- 9 de octubre de 2019: Votación en la 19ª Asamblea General de la SECyTA (en el marco del 1st Iberian Meeting in Separation Sciences and Mass Spectrometry).

Transcurrido los plazos establecidos, los miembros de la SECyTA que presentaron su candidatura a estas elecciones 2019 fueron los siguientes:

Presidente:

- Dra. Ana María García Campaña (Universidad de Granada).

Vicepresidente:

- Dr. Joan Grimalt Obrador (IDAEA-CSIC, Barcelona).
- Dr. Francisco Javier Santos Vicente (Universidad de Barcelona).

Secretario:

- Dr. Juan Vicente Sancho (Universitat Jaume I, Castelló).

Vocales:

- Dr. Mario Fernández Martín (IQOG, CSIC, Madrid).
- Dra. Belén Gómara Moreno (IQOG, CSIC, Madrid).
- Dra. Elena González Peñas (Universidad de Navarra, Pamplona).
- Dra. Begoña Jiménez Luque (IQOG, CSIC, Madrid).
- Dra. Marta Lores Aguin (Universidad de Santiago de Compostela).
- D. Josep Monge Consul (Agilent Technologies, S.A.).
- D. Josep Maria Sangenis (Scion Instruments, S.A.).

Todas las candidaturas presentadas han sido avalladas por la Junta de Gobierno. Respecto a las candidaturas presentadas, el Presidente comenta que debido a que uno de los Vicepresidentes, Ana M.^a García Campaña, ha dimitido de su cargo y se ha presentado a Presidente, hay un cargo más a elegir respecto a los que serían por cese estatutario.

A continuación, se procedió a constituir 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 reciente que se encuentre presente en la Asamblea. El Presidente cede la palabra al Secretario de la SECyTA para que se pueda constituir la Mesa electoral, que correspondió al Dr. José Carlos Díez Masa (N.º socio 23) y la D. Jesús Nicolás Carcelén (N.º socio 1948).

Una vez constituida la Mesa Electoral y entregado el Censo de Socios, el Acta de Votación y los votos recibidos por correo se inició la votación. Con el fin de no alargar innecesariamente la Asamblea, se trataron el resto de puntos del Orden del día mientras se procedía a la votación de los asistentes.

2. Informe del Presidente

En su informe, el Presidente trató los siguientes temas.

2.1. *Celebración del 1st Iberian Meeting in Separation Sciences and Mass Spectrometry – Santiago de Compostela 2019*

El Presidente da las gracias a las Dras. Marta Lores y Carmen García-Jares, como Presidentas del 1st Iberian

Meeting in Separation Sciences and Mass Spectrometry, a los miembros de su grupo de investigación y a todos los integrantes del Comité Organizador y Científico de esta reunión científica por el excelente trabajo realizado para poder ofrecer un programa científico de calidad a la altura de las expectativas de los socios, todo ello complementado con un programa social con el que ya estamos disfrutando de la ciudad de Santiago de Compostela.

En esta ocasión, la XIX Reunión de la SECyTA se celebra de forma conjunta con la IX Reunión de la Sociedad Española de Espectrometría de Masas y la VI Reunión del Grupo de Espectrometría de Masas de la Sociedad Portuguesa de Química bajo el nombre de 1st Iberian Meeting in Separation Sciences and Mass Spectrometry, con un programa científico común para favorecer un mayor contacto entre los socios de las diferentes sociedades. El Presidente indica que este congreso puede ser la semilla de futuros eventos de carácter internacional en los que puedan participar las Sociedades de países del sur de Europa relacionadas con la Cromatografía y las técnicas de separación en general y con la Espectrometría de Masas.

En esta edición, se han recibido un total de 183 comunicaciones, distribuidas en 27 orales ordinarias, 22 orales de jóvenes investigadores, 16 de las cuales optan al premio José Antonio García Domínguez, y 126 pósteres, de los cuales 13 han sido seleccionados para su presentación en formato flash, además de 7 conferencias invitadas y una conferencia dedicada a conmemorar el Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos. El número total de inscritos en esta edición (alrededor de 197 congresistas) es muy similar al alcanzado en reuniones anteriores (Granada 2018, 190 inscritos; Sevilla 2016, 180 inscritos; reunión conjunta SECyTA-SEEM, celebrada en Castellón en 2015, 185 inscritos). En este sentido, el Presidente indica que seguimos manteniendo un nivel de participación similar al conseguido en ediciones anteriores.

Respecto a las becas de inscripción y ayudas de viaje concedidas para facilitar la asistencia de los jóvenes investigadores a esta edición de la SECyTA 2019, se han concedido 32 becas de inscripción (250 €) y 32 ayudas de viaje (175 €), por un importe total de 13.600 €.

Como en años anteriores, se ha gestionado con la revista Journal of Chromatography A la creación de un volumen especial virtual dedicado a recoger los

trabajos presentados en este congreso denominado como "IMSS&MS 2019", para dar la posibilidad a los socios de las tres sociedades la presentación de sus comunicaciones en formato de artículo. Los trabajos presentados deberán seguir el proceso habitual de revisión por pares para su aceptación. El Presidente recuerda que la fecha límite para el envío de trabajos es el 31 de enero de 2020. Todos los asistentes a este congreso han recibido por email las instrucciones para el envío de los trabajos y estas instrucciones están también disponibles en la web de la reunión. Si hubiese alguna extensión de la fecha límite para el envío de los artículos se comunicaría a los socios y se actualizaría también en la web de la reunión.

El Presidente aprovecha para informar que el volumen especial virtual de la reunión SECyTA 2018, celebrada en Granada, ya se puede consultar en la web de la revista *Journal of Chromatography A*, en el apartado de "Article collections". El número total de artículos aceptados hasta el momento es de 7 de un total de 25 trabajos enviados. En septiembre de 2019 quedaban aún 6 artículos en revisión de los cuales 3 ya están aceptados, aunque no aparecen aún en el VSI. Comparado con los volúmenes especiales virtuales de SECyTA-JAI 2017 (7 artículos), SECyTA-SEEM 2015 – Castellón de la Plana (7 artículos), el número total de artículos es similar, aunque inferior al VSI SECyTA 2016-Sevilla, que fue de 16 artículos. Si hacemos una revisión histórica de la evolución del número de artículos podemos ver que el número total de artículos es inferior a los alcanzados en la reunión de SECyTA-JAI 2014, 9 artículos, SECyTA 2013 (Tenerife), 12 artículos, SECyTA 2012 (Tarragona), 14 artículos, y SECyTA-ISC 2011 (Valencia), 29 artículos. Desde la Junta queremos seguir impulsando la publicación en esta revista científica de los trabajos presentados en nuestras reuniones. Creemos que mantener la relación con la revista *Journal of Chromatography A* supone un prestigio para nuestra sociedad y sirve para dar a conocer la investigación que se realiza en nuestro país.

2.2. *Cierre económico de la XVIII Reunión SECyTA 2018*

El Presidente informa que una vez finalizada la XVIII Reunión Científica de la SECyTA, celebrada en Granada del 2 al 4 de octubre de 2018, se ha recibido por parte de los organizadores de la Reunión el balance económico final. Antes de nada, el Presidente felicita a la Dra. Ana María García Campaña y a todo su gru-

po de investigación y colaboradores por el éxito de la reunión y agradece la dedicación y el trabajo realizado que ha permitido a todos los asistentes disfrutar de un programa científico de calidad y de un excelente programa social, todo ello en un magnífico entorno como es la ciudad de Granada. El Presidente comenta que esta reunión será recordada con mucho cariño por todos los asistentes.

Respecto al balance económico, cabe señalar que ha sido positivo. Con este balance positivo se ha podido cubrir todas las becas concedidas, 48 becas, pese a que en esta ocasión el número de becas ha sido muy superior a las concedidas en ediciones anteriores, que oscilaban alrededor de 35. Es evidente que tener un número variable de becas de inscripción siempre supone para el organizador una variable dentro del presupuesto que no puede prever y, en este sentido, sería conveniente para futuras reuniones fijar un número de becas de inscripción que el organizador asuma (p. ej., 35 becas) y, en el caso de que la Sociedad conceda un número mayor, sea ésta la que se haga cargo de dicho coste. Este es un tema que la Junta debería abordar y discutir en futuras reuniones. En todo caso el tesorero nos podrá dar información más detallada del cierre económico del congreso.

2.3. *XV Edición de los premios José Antonio García Domínguez – SECyTA 2019*

El Presidente informa de la convocatoria de la XV Edición de los Premios José Antonio García Domínguez. En esta edición, se han presentado un total de 16 comunicaciones orales de jóvenes investigadores y 33 pósteres. El jurado encargado de fallar dichos premios se ha escogido entre los miembros del Comité Científico y Organizador y el acto de entrega de los mismos tendrá lugar el viernes 11 de octubre durante la ceremonia de clausura del congreso. El Presidente agradece a Bruker, y en particular a Miguel Ángel Pérez, el apoyo y patrocinio de estos premios que ha permitido mantener su vigencia durante 15 años.

2.4. *Colaboración de la SECyTA en la 4th International Mass Spectrometry School*

Como ya se informó en la anterior Asamblea, la SECyTA ha participado como sociedad colaboradora en la 4th International Mass Spectrometry School: Raiders of the Latest Advances in Mass Spectrometry, organizada por la Sociedad Española de Espectrome-

tría de Masas (SEEM) y con la colaboración de la Sociedad Española de Proteómica, la Sociedad de Espectroscopia Aplicada y la Sociedad Española de Química Analítica. La Escuela se celebró del 15 al 20 de septiembre de 2019 en Sitges (Barcelona) con un enorme éxito de participación, alrededor de 100 asistentes, y con la presencia de profesores de reconocido prestigio. Además, tanto los temas tratados como las actividades realizadas fueron muy apreciadas por todos los asistentes. Próximamente, la Dra. Encarnación Moyano, Presidenta de la SEEM, informará a los Presidentes de las Sociedades colaboradoras de los aspectos organizativos y económicos más relevantes de la 4th IMSS.

De acuerdo con la decisión tomada por la Junta de Gobierno en la reunión del 23 de enero de 2019 se estableció la concesión de un máximo de 10 becas de inscripción para la asistencia a la 4th IMSS de socios jóvenes miembros de la SECyTA y se confeccionó una normativa específica para la concesión de las ayudas. La fecha límite para la presentación de la documentación fue el 15 de mayo de 2019 y se recibieron un total 8 solicitudes, 5 enviadas directamente a nuestra Secretaria y 3 a través de los organizadores. Una vez comprobado que todas las solicitudes cumplían con la normativa establecida, se comunicó su concesión el 30 de mayo de 2019. En esta ocasión, la forma de hacer efectiva el pago de las becas de inscripción es directamente a través de la Secretaria Técnica de la Escuela para poder recuperar el IVA.

2.5. Colaboración de la SECyTA en otros congresos

El Presidente informa que la SECyTA ha participado como sociedad colaboradora en diferentes Reuniones y Congresos concediendo becas para facilitar la asistencia de jóvenes socios. Se han concedido 10 becas para la asistencia a congresos internacionales y 4 becas a congresos patrocinados. El Secretario informará detalladamente en el correspondiente orden del día de las ayudas y los congresos con los que se ha colaborado y patrocinado.

Estos datos demuestran el esfuerzo y la clara apuesta que desde la SECyTA se está llevando a cabo para fomentar la divulgación del trabajo de nuestros jóvenes investigadores. El Presidente espera que esta política permita ayudar a la formación en Cromatografía de los futuros profesionales e investigadores.

2.6. Ley de protección de datos

El Presidente comenta que como ya informó en la anterior Asamblea General celebrada en Granada, se están realizando los últimos cambios a nivel de documentación y de web para estar totalmente adaptados a Ley de Protección de datos. En mayo y septiembre de este año se pasaron dos auditorías internas y está pendiente de incorporar en la web todos los temas de política de cookies y avisos legales sobre protección de datos. Se espera poder tener todo completado antes que finalice este año. Los informes recibidos hasta el momento, emitidos por Conversia, confirman la adecuada gestión llevada a cabo respecto a la confidencialidad de los datos que dispone la sociedad de sus socios.

Debido a la nueva ley de Prevención del Blanqueo de Capitales y de la Financiación del Terrorismo, como Asociación estamos obligados a elaborar un protocolo de política interna sobre la gestión económica de los fondos de la SECyTA, un informe de Análisis y Gestión y evaluación de Riesgos y las medidas y procedimientos requeridos. Conversia se encargará de gestionar toda la documentación necesaria y establecer las pautas y procedimientos de acuerdo con la actual ley y sus posibles modificaciones.

2.7. Informe del Editor del Boletín

El Presidente solicita a la Dra. María Luz Sanz, editora del Boletín de la Sociedad, que haga un pequeño resumen de los aspectos más relevantes de este último año. En este sentido, la Dra. Sanz comunica que el Dr. Francisco Javier Moreno dejará de ser editor del Boletín y la propuesta es que sea sustituido por la Dra. Ana Isabel Ruiz Matute. La Dra. Sanz agradece al Dr. Moreno su dedicación y esfuerzo por mantener y mejorar el Boletín de la SECyTA a lo largo de todos estos años.

En nombre de los editores del Boletín, la Dra. María Luz Sanz recuerda a los socios que el Boletín es la revista de la Sociedad y que tenemos que sentirla como propia y estar orgullosos de publicar en ella y de poder contribuir con nuestros trabajos. La Dra. Sanz recuerda que hay secciones que no se incluyen en algunos números porque no hay aportaciones de los socios, como la sección de reseñas bibliográficas. Además, también recuerda a los socios jóvenes que redactar un artículo para el Boletín también es un trabajo formativo, y que no hay ningún problema en publicarlo en inglés, si les resulta más sencillo. También recuerda a los socios jóvenes la sección de resúmenes

de Tesis Doctorales defendidas por los socios, que empezó muy fuerte cuando se lanzó, pero que en los últimos números ha descendido, y seguro que no es porque los socios no presenten Tesis Doctorales. Así que anima a los socios presentes que envíen sus resúmenes al Boletín cuando defiendan sus Tesis.

El Presidente recuerda a los socios la importancia del Boletín, que se seguirá editando en papel, aunque las nuevas tecnologías parece que indiquen lo contrario. También recuerda que el Boletín se encuentra en formato PDF en la web de la SECyTA, y exhorta de nuevo a que se envíen contribuciones en forma de artículos, resúmenes de tesis, etc., para mantenerlo activo y útil para todos los asociados.

2.8. Organización de la próxima Reunión Científica SECyTA 2020

El Presidente recuerda a los presentes que el próximo año 2020 se celebra en Barcelona una nueva edición de Expoquimia y dentro de este marco las Jornadas de Análisis Instrumental. Se recibió la propuesta por parte de Pilar Navarro, como Directora de Expoquimia, de organizar las próximas Jornadas de Análisis Instrumental que se celebrarán del 2 al 5 de junio de 2020. Desde la Junta se ha discutido en diferentes reuniones mantenidas a lo largo de este año sobre la conveniencia de seguir manteniendo el compromiso de organizar las JAI. Se ha recabado la opinión de las casas comerciales que colaboran habitualmente con la SECyTA y todas ellas coinciden en que Expoquimia ha pasado de ser una Feria de ámbito nacional a local en lo que se refiere a la exposición de instrumentación analítica. Es evidente que las JAI han ido perdiendo su atractivo también para los miembros de la SECyTA y desde la Junta creemos que no tiene mucho sentido que estas Jornadas sean organizadas por una única Sociedad cuando el espíritu de la Reunión era reunir a investigadores y especialistas de diferentes campos de la Química Analítica, miembros de diferentes sociedades y ámbitos profesionales, con un mismo denominador común como es el análisis instrumental.

Una vez estudiados todos estos aspectos se decidió finalmente en la última reunión de la Junta de Gobierno de la SECyTA, celebrada en julio de 2019, por unanimidad rechazar la propuesta de organización de las JAI 2020. Por supuesto que las puertas no están cerradas a que se pueda plantear en un futuro la organización de futuras ediciones de estas Jornadas.

El Presidente anuncia que la próxima reunión Científica SECyTA 2020 (XX Reunión de la SECyTA, 49ª GCTA) se celebrará en Almería a principios de octubre de 2020 y la organización correrá a cargo de la Dra. Ana Agüera, miembro de la SECyTA y antigua vocal de la Junta, a quien quiere agradecer que haya aceptado este encargo. Asimismo, el Presidente comenta que ya se está trabajando en la reunión del 2021, y a través del Dr. Joan Grimalt se ha contactado con el Dr. Manel Miró de la Universitat de les Illes Balears para poder realizar la Reunión de 2021 en Mallorca.

El Presidente recuerda que ahora el horizonte es Almería 2020 y, por ello, pide la participación de todos los socios para que la próxima reunión sea un éxito. Desde la Sociedad se mantendrá a los socios informados puntualmente de la organización de la Reunión y espera que nos podamos volver a ver todos en Almería. De momento podéis reservar en vuestras agendas la primera semana de octubre de 2020 para asistir a la reunión. Desgraciadamente, por motivos familiares, a la Dra. Agüera le ha sido imposible asistir a este congreso, pero nos ha enviado una pequeña presentación con el anuncio del Congreso. El Presidente comenta que al final de la asamblea, la Dra. Ana M.^a García Campaña realizará una breve presentación de SECyTA 2020 en Almería.

3. Informe de la Secretaria

En su informe, la Secretaría trató los siguientes temas.

3.1. Socios de la SECyTA

El Secretario de la SECyTA, Dr. Juan V Sancho, informa que, desde la última Asamblea General celebrada el 3 de octubre de 2018 en Granada, hasta hoy, 9 de octubre de 2019, se han recibido un total de 26 altas y 32 bajas. Tras cuatro ediciones (2012-2015) con balances negativos en número de socios, y dos ediciones (2016-2017) con balances positivos, se mantiene el cambio de tendencia observado en la anterior edición con ligeras bajadas, en este caso con un balance neto de -6 socios. En el listado actual de Secretaría el número de socios a día de la celebración de esta Asamblea es de 527 socios. El Secretario exhorta a los socios a que se animen a promocionar la Sociedad entre sus colegas, amigos, compañeros de departamento, estudiantes, etc., para hacer más grande, aun si cabe, la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines.

El número de altas ha disminuido respecto en la media de los últimos dos-tres años y de las 32 bajas, sólo 3 corresponden a bajas estatutarias (debido a que el socio en cuestión lleva tres impagos consecutivos) y 1 corresponde a la jubilación de la Dra. Pilar Zamorano. El resto de bajas engloban las bajas anuales habituales, típicamente por cambios profesionales donde las técnicas cromatográficas ya no son tan importantes.

Al respecto de las bajas, el Secretario recuerda, aunque supone que también lo hará el Tesorero, que el socio que desea darse de baja, lo comunique a Secretaría o Tesorería a principio de año (enero o febrero) para que ya no se le pasen las cuotas y no genere gastos innecesarios por devolución de recibos.

3.2. *Ayudas concedidas por la SECyTA*

Se han concedido un total de 10 ayudas (de 500 € cada una) para la asistencia a congresos internacionales, distribuidos de la siguiente forma:

- General Assembly of the European GeoSciences Union, Viena (Austria).
- 17th International Conference on Chemistry and the Environment (ICCE-2019), Thessaloniki (Grecia).
- 48th International Symposium on High-Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques (HPLC 2019), Milán (Italia).
- 4th International Conference on Ionic Liquids in Separation and Purification Technology, Sitges (España).
- XX Euro Analysis 2019, Istanbul (Turquía).
- 9th International Symposium on Recent Advances on Food Analysis (RAFA 2019), Praga (República Checa).

En este año la inversión en ayudas para que nuestros socios jóvenes puedan asistir a eventos internacionales se ha incrementado notablemente y se ha vuelto a niveles de 2017.

Se han concedido un total de 4 ayudas para la asistencia a congresos patrocinados por nuestra Sociedad, distribuidos de la siguiente forma:

- 25th Latin-American Symposium on Biotechnology, Biomedical, Biopharmaceutical, and Industrial Applications of Capillary Electrophoresis and Microchip Technology (LACE 2019), Alcalá de Henares (España).

Asimismo, se ha colaborado con la 4th International Mass Spectrometry School IMSS celebrado en Sitges, del 15 al 20 de septiembre de 2019, concediendo 8 ayudas de inscripción.

Por lo tanto, en este año la inversión en ayudas para que nuestros socios jóvenes puedan asistir a eventos patrocinados también se ha incrementado notablemente, aunque no se ha vuelto a niveles de 2017. En cualquier caso, la política de becas debería revisarse en función de la disponibilidad presupuestaria de la Sociedad.

En el caso de la presente Reunión, la Sociedad ha concedido un total de 32 becas de inscripción a la XIX Reunión Científica de la SECyTA y 32 ayudas de viaje a jóvenes investigadores socios de la SECyTA que se desplazan desde fuera de Santiago de Compostela. De nuevo, poner de manifiesto el esfuerzo de la Sociedad para que sus socios estudiantes puedan asistir y difundir los resultados de sus investigaciones.

3.3. *Colaboración de la SECyTA con otros congresos*

La SECyTA colaboró en la celebración del 25th Latin-American Symposium on Biotechnology, Biomedical, Biopharmaceutical, and Industrial Applications of Capillary Electrophoresis and Microchip Technology (LACE 2019), Alcalá de Henares (España). La colaboración consistía en la concesión de ayudas para la asistencia a dicho congreso apareciendo el logo de la Sociedad en la correspondiente web del congreso. Como se ha indicado en el punto anterior, se solicitaron y concedieron 4 ayudas.

Asimismo, se ha colaborado con la 4th International Mass Spectrometry School IMSS celebrado en Sitges, del 15 al 20 de septiembre de 2019, concediendo 8 ayudas de inscripción, como también se ha comentado en el punto 3.2.

3.4. *Comunicación electrónica con los socios*

El Secretario informa que aproximadamente desde mediados de Febrero se migró la base de datos de correos electrónicos de los socios desde el sistema de Google Groups disponible en su institución para el envío masivo de correos electrónicos, al sistema propio de la empresa de Hosting donde se ubica la web de la SECyTA. Este sistema permite listas de correos con hasta 5.000 direcciones, por lo que se prevé que no habrá problemas de saturación en un futuro cercano.

De este modo, el mantenimiento de la base de datos de correo electrónico de los socios será mucho más sencilla, ya que no dependerá de la institución a la que pertenezca el Secretario y que habitualmente, conllevaba etapas de migración complejas, con los cambios del mismo.

La dirección de correo de envío será secretaria@secyta.es y, desde la misma, recibirán los socios los envíos de comunicación por parte de Secretaria con novedades, cursos, congresos, ofertas de trabajos, etc.

Se recuerda a los socios que sigan utilizando la dirección secretaria.secyta@gmail.com para altas, preguntas, cuestiones, etc.

3.5. *Special issue Journal of Chromatography A*

Como ya ha mencionado el Presidente, desde Secretaría también se recuerda a los asistentes que se pueden enviar los trabajos presentados a la Reunión actual como artículos a publicar en un Volumen Virtual Especial de la revista *Journal of Chromatography A*, como se ha venido haciendo en los 7 años anteriores. Las instrucciones para el envío de los artículos, así como la fecha límite (31 de enero de 2020) están indicados en la página web del congreso. Se anima a los socios a que envíen los trabajos a publicar ya que los números de los últimos años eran relativamente bajos para el número de comunicaciones presentadas a la Reunión, aunque la pasada edición se ha producido un repunte que debemos intentar consolidar.

4. Informe del Tesorero

En el informe del Tesorero se trataron los siguientes asuntos.

El Tesorero de la SECyTA, Dr. Jordi Díaz Ferrero, presenta el estado de cuentas y el balance de ingresos y gastos desde la pasada Asamblea General celebrada en Granada el 3 de octubre de 2018, pero del período del 01-07-2018 al 30-06-2019, ya que como se comentó en la pasada Asamblea, las cuentas se han de aprobar por la misma según los Estatutos hasta el 30 de junio, fecha anterior a la Asamblea, ya que el ejercicio económico se cierra en esa fecha. Asimismo, se debe presentar un balance de situación comparando el patrimonio neto y el pasivo corriente frente al activo corriente. Sin embargo, este año de transición, el Tesorero también presenta un balance de entradas y salidas de caja como el que ha venido presentando en las últimas asambleas. El importe total al que asciende

el saldo de la cuenta es prácticamente idéntico al que se presentó en Granada hace un año.

Respecto a este balance el Tesorero llama la atención sobre los siguientes puntos:

- Como se puede observar el Boletín en este ejercicio se ha autofinanciado completamente ya que los ingresos por publicidad superan a los costes de edición, reparto y gratificación de colaboraciones. El Tesorero felicita a los editores del Boletín por la gestión en el cambio de empresa editora que ha permitido rebajar significativamente los costes.
- Respecto a las cuotas de empresas, el Tesorero agradece a las mismas su aportación al balance anual.
- Respecto a las cuotas de socios, tenemos unos ingresos más o menos estables debido, tanto al mantenimiento del número de los mismos, como al del valor de la cuota, desde el año 2000. Los gastos serían de emitir los recibos, devoluciones, etc.
- Este año los Gastos de Junta siguen siendo más elevados de lo habitual, no por realizar más Juntas de Gobierno, sino por incorporar en este capítulo, dos nuevos conceptos que ya incorporamos el ejercicio pasado, como son la empresa contratada para gestionar la Ley de protección de Datos, así como la Asesoría Fiscal, que también se ha contratado.
- Los gastos respecto a la web han sido bajos, sólo mantenimiento de dominio.
- Respecto a los impuestos, básicamente la declaración del IVA e IRPF.
- Los intereses no compensan los gastos bancarios, a pesar del depósito fijo que dispone la Sociedad.
- En el apartado de Congresos tenemos un balance negativo porque generalmente se contabilizado los gastos del Congreso del año en curso, que se suele realizar en octubre, después del cierre del ejercicio económico, mientras que los ingresos se contabilizan el siguiente ejercicio. Este hecho recuerda el Tesorero que ya lo avisó en la pasada Asamblea General, al cerrar el ejercicio económico a 30 de junio.
- El apartado de Becas de ayuda a asistencia congresos internacionales y patrocinados, como ya ha comentado anteriormente el Secretario, no coincide con el importe indicado, ya que las ayudas se pagan en dos plazos y el segundo plazo de muchas de ellas todavía no se ha rea-

lizado, y queda para el siguiente ejercicio económico.

- Por lo tanto, tenemos un balance positivo.

A continuación, el Tesorero presenta el balance económico de situación del ejercicio económico 2018/2019 que ha preparado el asesor fiscal, presentando el Patrimonio Neto, así como los Activos y Pasivos corrientes de la Sociedad. Aunque los conceptos varían ligeramente sobre el balance de caja presentado anteriormente, tenemos un balance cuadrado y con saldo positivo, menor al de caja, ya que hay facturas que se han emitido antes del cierre del ejercicio, pero todavía no se han cobrado. En cualquier caso, confirma la misma tendencia que el anterior.

A continuación, el Tesorero presenta el balance económico de la XVIII Reunión Científica de la SECyTA celebrada en Granada en 2018. Cabe destacar que el balance de la reunión ha sido positivo. El Tesorero da las gracias a la Dra. Ana M.^a García Campaña y a todo su grupo porque la reunión ha sido positiva también en el aspecto económico.

A continuación, el Tesorero presenta un resumen de lo que ha supuesto económicamente para la Sociedad este congreso. El Tesorero comenta que los gastos en becas de inscripción no concuerdan con el importe indicado anteriormente por el Secretario, ya que uno de los becados inconcebiblemente no cobró el cheque con la ayuda. En definitiva, el coste que supuso para la Sociedad el congreso de Granada fue el aporte de las ayudas de viaje de los estudiantes socios jóvenes.

Al final de su intervención, el Tesorero aborda algunos temas generales, y en primer lugar comenta el tema de los impagados, que este año ha habido unos 16, y que nos genera gastos bancarios. Por lo tanto, el Tesorero recuerda a los socios que si en lugar de no pagar la cuota correspondiente al año en curso se avisase a la Sociedad de la baja correspondiente antes de pasar al cobro de las cuotas (habitualmente a final del primer trimestre), se haría un favor a la Sociedad.

Finalmente, el Tesorero muestra un balance económico final de los últimos cuatro años (2016-2019) de la Presidencia del Dr. Javier Santos. El balance global es ligeramente positivo. El Boletín durante estos cuatro años prácticamente se ha autofinanciado. Los cuatro congresos de este período han sido positivos o muy poco negativos. Asimismo, también se ha incorporado en estos cuatro años el tema de la Asesoría Fiscal y se ha abordado el tema de cumplimiento de la Ley de Protección de Datos.

Para terminar su intervención, el Tesorero recuerda el montante invertido en concesión de becas a los socios jóvenes para asistencia a congresos internacionales, patrocinados y a nuestra propia reunión durante estos últimos cuatro años, que supone un 30 % más respecto al período anterior. El Tesorero da las gracias a los socios, a las empresas y a los organizadores de los congresos que han hecho posible y contribuido a que la Sociedad haya podido dar estas ayudas a sus socios jóvenes.

El Tesorero recuerda que termina su mandato dentro de dos años y llevará para entonces diez años de tesorero de la SECyTA, por lo que anima a los socios a que presenten su candidatura a Tesorero para la próxima renovación parcial de la Junta en 2021.

El Presidente indica a los socios que han solicitado las ayudas que, para no alargar la Asamblea, se acerquen al lugar de la sala donde se encuentran el Secretario y el Tesorero para recibir el cheque bancario correspondiente, toda vez que ya han finalizado sus respectivos informes.

6. Ruegos y preguntas

A continuación, se abre el turno de ruegos y preguntas.

La Dra. Galcerán pide la palabra para informar a los asistentes que se ha depositado en la Biblioteca de Física y Química de la Facultad Química de la Universidad de Barcelona una copia completa en papel de todos los volúmenes del Boletín desde su inicio hasta la actualidad. Esta copia se ha podido completar por la cesión de los volúmenes que disponía el Dr. Xavier Guardino y la Dra. Galcerán y se seguirá manteniendo actualizada con el envío de los volúmenes que se vayan generando. El Presidente agradece a la Dra. Galcerán y al Dr. Xavier Guardino el trabajo dedicado para preparar esta edición del Boletín y les felicita por su iniciativa.

La Dra. Galcerán pregunta sobre los criterios seguidos en la selección de las comunicaciones tipo flash y el tiempo que dedicado en este congreso para las sesiones de pósteres. La Dra. Lores y la Dra. García-Jares ponen de manifiesto las dificultades que han tenido los organizadores para poder dar más tiempo a la presentación de las sesiones de pósteres y reconoce que hubiese sido mejor fijar los días de presentación en función de las temáticas. Este tema se tendrá en cuenta para dar más peso a las sesiones de presentación y discusión de pósteres en futuras reuniones.

La Dra. Mercedes de Frutos pide la palabra para agradecer públicamente a los editores del Boletín por el excelente trabajo desarrollado durante todos estos años, pese a las dificultades que supone, que ha permitido tener un Boletín útil para todos los socios, con artículos de interés e información actualizada de todas las actividades e iniciativas desarrolladas por la SECyTA.

5. Continuación de punto 5 del Orden del día: Elecciones a la Junta de Gobierno

Una vez finalizado el proceso de 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, el Presidente de la Mesa Electoral, Dr. José Carlos Díez Masa, comunica a los presentes el resultado de la votación:

Votos emitidos totales: 111.

Votos emitidos válidos: 110.

Votos nulos: 1.

El reparto de los votos emitidos ha sido el siguiente:

Presidente:

- Dra. Ana María García Campaña (Universidad de Granada): 110.

Vicepresidente:

- Dr. Joan Grimalt Obrador (IDAEA-CSIC, Barcelona): 99.
- Dr. Francisco Javier Santos Vicente (Universidad de Barcelona): 101.

Secretario:

- Dr. Juan Vicente Sancho (Universitat Jaume I, Castelló): 105.

Vocales:

- Dr. Mario Fernández Martín (IQOG, CSIC, Madrid): 93.
- Dra. Belén Gómara Moreno (IQOG, CSIC, Madrid): 95.
- Dra. Elena González Peñas (Universidad de Navarra, Pamplona): 96.
- Dra. Begoña Jiménez Luque (IQOG, CSIC, Madrid): 88.
- Dra. Marta Lores Agujín (Universidad de Santiago de Compostela): 104.
- D. Josep Monge Consul (Agilent Technologies, S.A.): 91.
- D. Josep Maria Sangenis (Scion Instruments, S.A.): 84.

Una vez finalizada la votación, el Presidente quiere agradecer el trabajo realizado por los miembros de la Mesa Electoral. Asimismo agradece a todos los socios de la SECyTA la participación en estas elecciones.

El Presidente toma la palabra para dar las gracias a los miembros de la Junta por su trabajo realizado, colaboración y apoyo que he recibido en todo momento durante estos cuatro años de mandato. Querría agradecer a los miembros salientes, Dra. Elena Ibáñez y Dr. Francisco Javier Moreno, y dar la bienvenida a los nuevos miembros, Dr. Mario Fernández y la Dra. Elena González. El Presidente agradece también a todos los socios su colaboración, participación y apoyo en todos los temas de gestión de la Sociedad, además de su comprensión. Como ya comentó el Presidente hace cuatro años su intención era permanecer un único mandato e intentar en la medida de lo posible mantener y mejorar los aspectos científicos y de organización que permitan afianzar a la SECyTA como una de las principales asociaciones científicas a nivel nacional e internacional. Desde la Junta se ha intentado canalizar las propuestas de los socios, promover actividades a nivel local o nacional, mejorar la calidad científica de nuestras reuniones e incrementar su participación, así como potenciar la política de becas para aumentar la asistencia de nuestros jóvenes investigadores y dinamizar el papel del Boletín y de nuestra web, para dar una mayor visibilidad a nuestras actividades. Otro aspecto que desde la Junta se ha intentado potenciar ha sido la participación e implicación de las casas comerciales en nuestras reuniones y, como habéis podido comprobar, tenemos una mayor presencia en nuestras reuniones. El Presidente le desea lo mejor a la nueva Presidenta de la SECyTA, la Dra. Ana María García Campaña, a quien felicita por su elección y espera poder ayudarla en todo lo que necesite.

La Dra. Ana M^a García Campaña presenta en nombre de la Dra. Ana Agüera la celebración de la XX Reunión de la SECyTA en Almería 2020. La sede será en el Palacio de Congresos de la Urbanización "El Toyo" en las proximidades del Cabo de Gata, que dispone de las salas e instalaciones adecuadas para la realización de este tipo de eventos. Además, el grupo de la Dra. Agüera ya tiene experiencia previa en la realización de reuniones en este Palacio de Congresos. En cuanto al alojamiento, alrededor del complejo existen bastantes hoteles de diferentes categorías y en Octubre los precios suelen ser bastante asequibles a pesar de que el tiempo sigue siendo agradable. Los accesos a Almería son más complicados, aunque hay aeropuerto local, sólo enlaza con Madrid y Almería, y el aero-

puerto de Granada sería una alternativa. Otros medios de transporte serían por carretera, autobús o vehículo particular, ya que el tren de momento no es una alternativa real. Almería es una ciudad pequeña y agradable junto a mar, dominada por la fortaleza árabe de la Alcazaba, con grandes paisajes como la Playa de Levante, el desierto de Tabernas, el Cabo de Gata... A nivel científico dispone de instalaciones singulares como el Observatorio de Calar Alto o la Plataforma Solar de Almería. Y a nivel económico es una potencia hortofrutícola a nivel europeo de cultivo bajo plástico. A nivel gastronómico resalta la cultura de la tapa. La Dra. García Campaña termina la presentación con otro emblema de Almería, David Bisbal, embajador de la misma, que nos espera a todos en octubre de 2020.

Asimismo, la Dra. García Campaña dedica unas palabras de agradecimiento al Presidente saliente, Dr. Javier Santos, en su despedida de la presidencia.

El Presidente toma la palabra para hacer un último comentario en relación con la denominada renovación parcial de la Junta de Gobierno, tal como indican los Estatutos. Con el paso de los años, la renovación no es

parcial a la mitad, por lo que la Junta de Gobierno actual, ha tomado la decisión de intentar que a las próximas elecciones tenga lugar esa renovación parcial real de más o menos la mitad de los miembros de la Junta.

La Dra. Mercedes de Frutos pide la palabra para proponer a la Dra. María Teresa Galcerán la redacción de una historia de lo que fue el grupo de Cromatografía de la RSEQ y lo que está siendo la Sociedad Española de Cromatografía, ahora que tendrá un poco más de tiempo y se le ve todavía muy activa. La Dra. Galcerán indica que tendrá que hablar con la "vieja guardia" para proponérselo.

En este punto del orden del día y a la vista de que no hay más ruegos ni preguntas ni más asuntos que tratar, el Presidente da por finalizada la 19ª Asamblea General de la SECyTA a las 19:32 h. del citado día, de todo lo cual doy fe como Secretario y firmo la presente con el VºBº del Presidente.

JUAN VICENTE SANCHO LLOPIS

Secretario de la SECyTA

Santiago de Compostela, 9 de octubre de 2019

NUEVOS SOCIOS

1940

Fu, Yandi
Universitat Rovira i Virgili
Marcel.lí Domingo, s/n
43007 Tarragona

1941

Vega Herrera, Albert
IDAEA-CSIC
Jordi Girona, 18-26
08034 Barcelona

1942

Sánchez Acevedo, Elayma
Laboratorio de Análisis del Aroma y Enología (LAAE)
Universidad de Zaragoza
Pedro Cerbuna, 12
50009 Zaragoza

1944

Bueno Aventín, Elena
Paseo Fernando el Católico, 54, 3.º D
50009 Zaragoza

1945

Argenté Baxeras, Carla
Institut Químic de Sarrià (IQS)
Via Augusta, 390
08017 Barcelona

1946

Mulero Raichs, Mar
Avenida Roures, 21
08755 Castellbisbal (Barcelona)

1947

Muñoz Solano, Borja
Benjamín de Tudela, 42, 2.º D.
31008 Pamplona (Navarra)

1949

Castillo Zamora, Aly Jesús
Dpto. de Química Analítica, Facultad de Química
Universidad de Santiago de Compostela
Avda. Das Ciencias, Campus Sur
15701 Santiago de Compostela (A Coruña)

1951

Vázquez Ferreiro, Lúa
Avenida de Lugo, 14
27891 Cervo (Lugo)

JUNTA DE GOBIERNO DE LA SECyTA (2019)

En la pasada 19ª Asamblea General de la SECyTA, celebrada el 9 de octubre de 2019, se procedió a la renovación de parte de la Junta de Gobierno de la SECyTA, quedando constituida como se muestra a continuación:



Joan O. Grimalt Obrador
Vicepresidente



Ana María García Campaña
Presidenta



Francisco Javier Santos Vicente
Vicepresidente



Juan Vicente Sancho Llopis
Secretario



Jordi Díaz Ferrero
Tesorero



Belén Gómara Moreno
Vocal



Elena González Peñas
Vocal



José Monge Consul
Vocal



Mario Fernández Martín
Vocal



Begoña Jiménez Luque
Vocal



Marta Lores Aguín
Vocal



Miguel Ángel Pérez Alonso
Vocal



Nuria Fontanals
Vocal



José A. González Pérez
Vocal



José M.ª Sangenis Magraso
Vocal

HOMENAJE A SOCIOS

LA REVISTA *THE ANALYTICAL SCIENTIST* DISTINGUE A DOS SOCIOS DE LA SECyTA

The Analytical Scientist (<https://theanalyticalscientist.com/powerlist/2019>), en su número de octubre del pasado año, ha hecho pública su ya conocida y esperada Power List 2019, en la que se da a conocer a los 100 científicos más influyentes en la química analítica seleccionados por la diversidad de su talento, ingenio y actual liderazgo a escala mundial en todas las áreas de esta disciplina. En esta ocasión, entre otros relevantes científicos de todo el mundo, han sido galardonados el doctor Alejandro Cifuentes, del Laboratorio de Foodomics (CIAL-CSIC), y la doctora Coral Barbas, directora del Centro de Metabolómica y Bioanálisis (CEMBIO, Universidad CEU San Pablo), ambos miembros destacados de la SECyTA.

En las 7 ediciones que ya abarca esta lista, es el tercer año en el que aparecen destacados investigadores españoles miembros de la SECyTA [CTA 37(2): 77 (2016); CTA 38(2): 77 (2017)]. Se da la circunstancia de que la Dra. Coral Barbas ya fue mencionada en esta lista en su edición de 2016. Tanto en la edición impresa como en la digital de esta revista se puede acceder a una breve reseña de los objetivos de la investigación de ambos científicos, así como a actividades o momentos destacables en su carrera investigadora.

Vaya desde aquí nuestra enhorabuena por estos premios que no hacen, sino reconocer los méritos de dos miembros muy notables de nuestra Sociedad.

PREMIO DE INVESTIGACIÓN "ERNESTO VIÉITEZ"



La investigadora María Celeiro, miembro de la SECyTA, en colaboración con María Llopart, pertenecientes al Laboratorio de Investigación y Desarrollo de Soluciones Analíticas (LIDSA) y al Instituto CRETUS de la Universidad de Santiago de Compostela, recibió una mención de

honor en los premios de investigación Ernesto Viéitez 2019, otorgados por la Real Academia Galega de



Alejandro Cifuentes es Profesor de Investigación del Laboratorio de Foodomics del Departamento de Bioactividad y Análisis de Alimentos del Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL-CSIC) de Madrid.



Coral Barbas es Catedrática de Química Analítica del Departamento de Química y Bioquímica y Directora del Centro de Metabolómica y Bioanálisis (CEMBIO) de la Facultad de Farmacia de la Universidad CEU San Pablo de Madrid.

Ciencias (RAGC). El trabajo premiado se basa en el desarrollo de una metodología analítica mediante microextracción en fase sólida seguida de cromatografía de gases-espectrometría de masas en tándem (SPME-GC-MS/MS) que permite la rápida determinación de 50 contaminantes emergentes en ríos cercanos a la costa gallego-portuguesa. Parte de este trabajo fue presentado como póster en la XVIII Reunión de la SECyTA celebrada en Granada en 2018 y recientemente ha sido publicado en la revista *Journal of Chromatography A*. La entrega del premio se realizó el 8 de octubre de 2019 en Santiago de Compostela, coincidiendo con la celebración del Día de la Ciencia en Galicia, que este año estuvo dedicado al químico D. Tomás Batuecas.

Meet Echo MS

Acoustic Ejection Mass Spectrometry (AEMS)
that is breaking the throughput sound barrier



Redefine your current and future workflows and open up a new frontier in contactless sampling

- **Accelerate the speed of analysis with 3 samples per second**
180 samples per minute, 11,000 samples per hour, 260,000 samples per day
- **Deliver rich datasets up to 50X faster**
Reduce the risk of missing lead compounds
- **Unparalleled standards of quantitation**
High reproducibility regardless of the matrix
- **Sample analysis direct from the plate, no LC is required**
Eliminate any carryover or errors associated with LC

See Echo MS in action at: sciex.com/EchoMS

ESTADÍSTICAS DE FUNCIONAMIENTO DE LA WEB DE LA SECyTA (2019)

Han pasado algo más de 5 años desde que hicimos un balance de la actividad que mantenía la web de la SECyTA, recién actualizada en aquel momento (CTA 35_2, 2014). Mediante el empleo de la herramienta Google Analytics (GA), hacemos ahora una puesta al día de las estadísticas que permitieron tener un mejor conocimiento de las métricas básicas. Seguiremos un esquema similar al de aquella publicación a efectos de ofrecer una comparación entre ambos períodos, teniendo en cuenta que, si bien en 2014 el período elegido fue de 18 meses, en esta ocasión lo hemos reducido a los 12 meses completos de 2019. Además, como se verá, han aparecido algunas funcionalidades que aportan datos interesantes y, quizás, también curiosos.

Empezando por la parte más general, podemos decir que, en el plazo analizado, nuestra web ha sido visitada por un total de 47.076 usuarios, de los cuales 46.012 son considerados por el sistema como nuevos usuarios, y se han abierto un total de 59.536 sesiones^[1]. Se considera usuario a quien ha iniciado, al menos, una sesión durante el periodo especificado; una sesión es el período durante el cual un usuario interactúa con la web. Otra información interesante es la del porcentaje de rebote, que hace alusión al porcentaje de visitas a una única página con la que no se ha interactuado o que se ha abandonado desde la misma página a la que se accedió, esto es, que duran 0 segundos. En nuestro caso, durante 2019, este porcentaje fue de 78,35 %. También podemos conocer que se han visitado 1,51 páginas por sesión y su duración media ha sido estimada en 1 minuto y 24 segundos^[2].

Los días en que se registró más actividad fueron el 26 de noviembre (con 373 usuarios), el 8 de octubre (322) y el 12 de noviembre (314)^[3]. Se puede apreciar la relación de la reunión de la SECyTA de Santiago de Compostela con los días de mayor afluencia de visitantes. Sin embargo, a modo de curiosidad, la actividad no cesó ni en fechas “señaladas”: el 1 de enero de 2019 (Año Nuevo) entraron 20 usuarios y el 25 de diciembre (Navidad), 13 usuarios.

Además de los ya citados 46.012 nuevos usuarios (que son los que han abierto una única sesión), 6.861

usuarios entraron en la web en dos sesiones, 2.043 en tres sesiones, 880 en cuatro sesiones y el resto en cinco o más sesiones. También se puede conocer la interacción de los usuarios con nuestra página, es decir, el tiempo que dura la visita. Los datos indican que para 48.102 usuarios la duración ha sido de entre 0 y 10 segundos, 2.936 de entre 181 y 600 segundos, 2.552 de entre 61 y 180 segundos, 2.519 de entre 601 y 1.800 segundos (la discrepancia en el número total de usuarios se debe al concepto poco intuitivo de lo que GA considera usuario y nuevo usuario, relacionados con el uso de un identificador o cookie asignado).

En cuanto al idioma, la información que nos devuelve GA indica aquél con el que está configurado el navegador de cada usuario. Los resultados muestran que el idioma más empleado es el español con un total de 41.031 usuarios (80,73 %), inglés un total de 8.888 usuarios (17,49 %), catalán 422 usuarios (0,83 %) y portugués 137 usuarios (0,27 %). Otros idiomas han sido el francés (91 usuarios), alemán (73), italiano (53), chino (48), ruso (21), gallego (19), vietnamita (18), coreano (10), checo (5), polaco (3) y euskera (3).

Sin embargo, el idioma no es indicativo directo del país desde donde se conectan los visitantes o usuarios de la web. El país desde el que se han recibido más visitas a la web es México, muy por delante del resto, con 18.375 (39,45 %), seguido de España (9.593; 20,6 %), Colombia (5.073; 10,89 %), Estados Unidos (2.093; 4,49 %), Argentina (2.070; 4,44 %), Chile (1.726; 3,71 %), Ecuador (1.424; 3,06 %), Perú (1.384; 2,97 %), Bolivia (772; 1,66 %) y Guatemala (498; 1,07 %)^[4]. El resto estuvo por debajo del 1 %. Llama la atención que el país que más visitas ha realizado sea México, pero también el enorme número de países centro y sudamericanos. También han visitado la web de la Sociedad desde Rusia, China, Hong-Kong, Malasia, Filipinas, Arabia Saudí o Ucrania.

Además, es posible ir más allá e identificar las ciudades desde las que se han conectado los usuarios. En los resultados obtenidos para esta información se observa que 6.595 usuarios (13,88 %) no han podido ser asignados a ningún país, bien porque

[1] 2014: 5112 usuarios, 8459 sesiones.

[2] 2014: 3,68 páginas por visita y 2 min 14 s de duración media.

[3] 2014: 117, 61 y 59.

[4] 2014: España 6212 s. (73,4 %), Suecia 347 s. (4,1 %), Méjico 308 s. (3,64 %), Argentina 142 s. (1,68 %).

GA no ha tenido acceso al parámetro o porque estaba anonimizado o no existe. A continuación, el mayor número de usuarios estaban ubicados en Ciudad de México (4.005; 8,43 %), Bogotá (2.192; 4,61 %), Madrid (1.806; 3,8 %), Chicago (1.520; 3,2 %), Barcelona (1.258; 2,65 %), Guadalajara Mx (1.189; 2,5 %), Santiago de Chile (1.121; 2,36 %), Medellín Co (598; 1,26 %), Puebla Mx (594; 1,02 %) y Quito (486; 1,02 %)^[5]. En total, de México ha habido conexión desde 34 ciudades diferentes, 283 puntos diferentes de la geografía española, 27 de Colombia o 31 de los Estados Unidos. Llama la atención el número de conexiones que se establecieron desde Nueva York (EE.UU., 37), Zhengzhou (China, 39), Ruskiy (Rusia, 1), Delhi (India, 1), Hung Yen (Vietnam, 1), Nang Kae (Tailandia, 1) o Mymensingh (Bangladesh, 1).

Alguna explicación a los sorprendentes resultados anteriores podría estar en las secciones de la web www.secyta.es que han sido visitadas. Haciendo una revisión pormenorizada de las visitas, 30 de las 50 páginas más consultadas han sido las relacionadas con el apartado de nomenclatura cromatográfica, en donde se ofrece, por secciones, el contenido del libro *Nomenclatura para cromatografía*, preparado por L.S. Ettre (*Pure. Appl. Chem.* 65 (1993) 819), traducido al español por M.I. Jiménez Vacas y revisado por M.V. Dabrio, J. Sanz e I. Martínez Castro, miembros del entonces Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines (GCTA) de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ), en 1995. Destacan de manera sobresaliente los accesos a las definiciones básicas (23 %) y los parámetros de retención (15,4 %). Aparte de este muy relevante dato, las visitas más repetidas han sido a la página de inicio de la web, la sección de empleo, la información sobre la reunión de la sociedad celebrada en Santiago de Compostela en 2019, los próximos congresos, la revista "*Cromatografía y Técnicas Afines*", cursos, becas, inscripción para ser socio, la junta de gobierno, nuevas tesis y las becas.

El acceso principal a nuestra web durante 2019 se ha hecho pinchando sobre algún enlace mostrado en los resultados de búsqueda de algún buscador registrado, en este caso, de Google (90 %) o escribiendo directamente el enlace de la web (7,6 %). Aunque son minoritarios, también se han empleado accesos desde Facebook, webs de otras sociedades (SEEM),

universidad (Santiago de Compostela o La Rioja) o buscadores más o menos reconocibles. En este sentido, son curiosas las búsquedas a partir del foro de una web de estilográficas.

De los navegadores más empleados, Chrome sigue siendo el más común (77,5 %), seguido de Safari (9 %), Firefox (4,4 %), Internet Explorer (4 %) y Edge (2,1 %)^[6]. El sistema operativo dominante en los dispositivos empleados para conectarse con la web de la sociedad ha sido Windows, con el 60 % de las visitas realizadas, Android (27,6 %), iOS (7,4 %) y McIntosh (4,2 %). Esto demuestra el gran empuje de la utilización de dispositivos móviles. En este caso, los sistemas Android (78,6 %) e iOS (21,1 %)^[7] acaparan la práctica totalidad de los equipos. De hecho, por tipo de terminal, los ordenadores son casi la mitad de los medios empleados por los 47.076 usuarios visitantes (65 %), los teléfonos móviles alcanzan el 33,5 % y las tabletas, el 1,6 % del total, sin otro tipo de terminal consignado en las estadísticas obtenidas.

En resumen, los datos por sí solos o comparados con los que se obtuvieron en 2014 se pueden considerar como muy positivos, pues en un período de 12 meses se ha obtenido un número de usuarios (47.076) muy superior al de entonces (5.112) registrados a lo largo de un período de 18 meses. Sorprende el elevadísimo número de visitantes que ha aportado México con casi el 40 % del total, distribuidos por un elevado número de ciudades del país (se han encontrado 30 diferentes), Colombia (cerca del 11 %) o Estados Unidos (4,5 %), singularmente desde Chicago, que ha sido la ciudad desde la cual el número de visitas ha sido el cuarto más numeroso.

Otra conclusión que hay que destacar de manera muy especial es el interés suscitado por el libro de *Nomenclatura para cromatografía* que recoge el porcentaje más alto de los intereses de los usuarios que han visitado nuestra web. De igual forma, queda constancia del avance del porcentaje de accesos desde dispositivos como los teléfonos móviles o tabletas, lo cual no sorprende en los tiempos que corren.

MARIO FERNÁNDEZ MARTÍN

Instituto de Química Orgánica General (CSIC)

^[5] 2014: Madrid 1924 s., Barcelona 864 s., Umea (Suecia) 319, Santander, Granada, Valencia, Sevilla, Valladolid y Tarragona (< 300).

^[6] 2014: Chrome 44,97 %, I. Explorer (25,0 %), Firefox (20,9 %), Safari (4,44 %).

^[7] 2014: Android (63,58 %), IOS (31,34 %), Windows Phone (1,94 %).



CONGRESOS CELEBRADOS

25th Latin-American Symposium on Biotechnology, Biomedical, Biopharmaceutical, and Industrial Applications of Capillary Electrophoresis and Microchip Technology (LACE)

The LACE conference was organized by Drs Alberto Escarpa and Agustín González Crevillen at the unique World Heritage Place of Alcalá University (Spain) and celebrated at the beautiful Colegio San Idelfonso, from September 29th until 2nd October 2019. This year, the LACE conference turned 25 years since its foundation by Professor Norberto A. Guzmán.

The conference was divided into the pre-symposium courses and the symposium. On Sunday morning, we started with the pre-symposium courses. These were very stimulating talks, the first course given by Dr Robert Weinberger, currently President of CE Technologies, Inc. (USA), was an introduction to Capillary Electrophoresis. The second presentation by Professor Norberto A. Guzmán from Princeton Biochemicals, Inc. (USA), spoke about clinical Capillary Electrophoresis. The third presentation by Professor Philip Britz-McKibbin from McMaster University (Canada) was focused on 'New advances in CE-MS for metabolomics and biomarker discovery: expanding throughput and metabolome coverage with quality control'. Finally, the last presentation of the pre-symposium course by Dr Flavio Della Pelle (Italy) was entitled 'Microchip-electrophoresis coupled to nanomaterial-based electrochemical detection in food analysis'.

On Sunday afternoon, after the warming welcoming words by the organizers, the opening session of the symposium included two plenary lectures. The first one by Professor Norberto A. Guzmán who talked about 'An insider's view of the evolution of clinical science through 25 years of annual LACE Symposiums' and the second one by Professor Robert Kennedy, Associate Editor of Analytical Chemistry journal, who talked about high throughput protein assays using microchip electrophoresis. After that, attendees could enjoy a welcome cocktail in one of the unique patios.

On Monday, the session started at 9:00 and lasted till 19 h in the afternoon. In total, 3 keynotes and 11 oral presentations took place mainly regarding

capillary electrophoresis coupled to mass spectrometry and microfluidics. In the morning, a coffee break and lunch were offered by the organization. In the afternoon, the coffee break was courtesy of Sciex who gave a talk about the advances in capillary electrophoresis for biopharmaceutical analysis. After that coffee seminar, it was the turn for the poster session. First, presentation of flash communications allowed several researchers to explain their results in a short time, and then, everybody was invited to see the exposed posters. When the session was finished, we enjoyed a tour around the old University and the chapel where we could learn more about the history of this University.

On Tuesday, a total of 16 presentations related to the application of capillary electrophoresis in different fields, microchip electrophoresis, enantiomeric separation, etc were presented in three plenary sessions. All the presentations were defended by PhD and post-doctoral students, full professors, or delegates from companies. Between sessions, the congress organization offered breakfast and lunch. In the afternoon, after the plenary sessions, a second flash communication session took place. In the evening, all the participants were invited to a classic music concert performed by two excellent musicians. The concert was followed by the gala dinner in the 'Hostería del Estudiante', a restaurant specialized in Castilian dishes in which all the assistants were able to enjoy good food and pleasant conversations.

On Wednesday, the last session of the congress started with the keynote entitled 'Ideal-filter by capillary electrophoresis' by Professor Sergey Krylov and it was followed by excellent presentations about the last advances of capillary electrophoresis in different fields which were presented by the professors Chapman, García Campaña, Benavente, Guttman and Cifuentes. The LACE 2019 concluded with the closing session where Professor El-Rassi, on the occasion of his 25 years as Editor-in-Chief of the Electrophoresis journal, held a plenary lecture entitled 'Nanoparticle-based separation media for electro- and liquid

phase-separation techniques'. Finally, the closing ceremony took place at Historic Paraninfo and was chaired by Professor Francisco Javier de la Mata (VicePresident for Research and Transfer of the Univer-

sity of Alcalá). During this ceremony the Poster Awards were announced and all participants were invited to attend the 26th edition of LACE in Rio de Janeiro (Brazil).

MARICRUZ MAMANI HUANCA

*Dept. of Chemistry and Biochemistry
San Pablo CEU University*

ALBERT PÉREZ ALCARAZ

*Dept. of Analytical Chemistry and Organic Chemistry
University Rovira i Virgili*

SAMUEL BERNARDO BERMEJO Y MAIDER GREÑO OCÁRIZ

*Dept. of Analytical Chemistry, Physical Chemistry
and Chemical Engineering
University of Alcalá*

9th International Symposium on Recent Advances in Food Analysis (RAFA 2019 – Prague)

The International Symposium on Recent Advances in Food Analysis (RAFA) is held every two years in Prague, Czech Republic. It is organized by the University of Chemistry and Technology (UCT) of Prague and the Wageningen Food Safety Research (WFSR) part of Wageningen University & Research (The Netherlands) and it is chaired by Prof. Jana Hajslova & Prof. Michel Nielen. This year, it was celebrated from 5th-8th of November and, according to the records, it received more than 750 participants from over 60 countries.

RAFA gives the opportunity to exchange the most recent advances in food analysis. It provides an overview of the trends in analytical and bioanalytical strategies aimed to food quality and safety control and it is a forum for presentation of challenges/new approaches in food and natural product analysis. In this sense, RAFA addressed sessions on many different topics such as mycotoxins, marine and plant toxins, migrants from food contact materials, processing contaminants, pesticide and veterinary drug residues, industrial contaminants, allergens and antinutrients, metals and metalloids, healthy nutrients, chemometrics, authenticity and food fraud, omics in food analysis, food forensics, microplastics, human biomonitoring, portable on-site food analysis, etc.

The conference started on Tuesday 5th with the welcome session and three plenary lectures by Prof.

Michael Rychlik, Christopher Elliott and Jana Hajslova on recent issues in food analysis. Later on, the conference was split into three parallel sessions in which oral presentations, particularly those by young scientists, were encouraged. The first session was aimed to recent issues and novel approaches, whereas the second and the third addressed the food authenticity and fraud topic and the analysis of biologically active, health promoting food components and food allergens.

The following days, three parallel sessions covering different topics were also run in different halls. Vendor seminars presenting the latest advances on instrumentation were also organized during lunch times. The exhibition and poster sessions were held during coffee breaks and lunches in order to make easier the exchange of ideas and the establishment of collaborations for future works.

On Wednesday 6th, sessions took place from 9 a.m. to 6 p.m. During this day, it was possible to attend several workshops and interactive seminars in addition to the exhibition area. Among others, the European Union Reference Laboratories (EURLs) presented their concerns in collaboration with international laboratories. Professor Rainer Malisch from Freiburg (Germany) presented the achievements and challenges of EURLs for analysis of halogenated persistent organic pollut-

INFORMACIONES

ants in feed and food. This session was a good occasion to update the state of the art regarding emerging pollutants food analysis. In the afternoon, Professor Nicholas Birse (Queen's University Belfast, United Kingdom) gave an interesting talk entitled "A comparison of high- and low-resolution ambient mass spectrometry techniques to characterize poultry meat" in Food authenticity & Fraud II session.

On Thursday 7th, another interesting workshop about portable food analysis and citizen science was organized where results from food smartphone project were presented.

This session was first introduced by professor Michel Nielen who gave a talk entitled "toward portable RAFA" for introducing the audience on the topic of the session. Moreover, Professor Marco Blokland (Wageningen Food Safety Research, Wageningen University & Research, Netherlands) presented a new portable mass spectrometer prototype based on GC-MS for on-site analysis of food contaminants. After the conference day, Gala dinner was celebrated at Martinic palace in the Prague Castle area. Attendees to the conference had the opportunity to enjoy a great dinner with typical Czech food and live traditional music with Czech group dances.

On Friday 8th, the conference started at 9 a.m. with three parallel sessions (Food contaminants and

residues, General food analysis and omics approaches in food analysis). In this last session, among others, Professor Jürgen M. Kuballa from GALAB laboratories GmbH, Hamburg-Germany, presented an interesting talk entitled "Recent advances in ion mobility high resolution mass spectrometry analysis – LC-IMS-QTOF MS- as a powerful tool for organic food authenticity". A summary session entitled "Food analysis beyond imagination" on RAFA 2019 highlights was held by Prof. Michele Suman (Barilla Advanced Research Laboratories, Parma, Italy). In addition, RAFA 2019 poster award and sponsored poster awards were given to the best poster presentations in different fields and the conference finished with a presentation of next RAFA 2021 by the chairs of the conference Jana Hajslova and Michel Nielen.

As can be observed, the organizers prepared a balanced programme including oral presentations by young scientist, workshops and interactive seminars. For this reason, I am very grateful to have had the opportunity to participate in this nice and useful event, and that is why I would like to acknowledge SECyTA for the travel support and the opportunity to attend the RAFA 2019 conference.

ANE ARRIZABALAGA LARRAÑAGA
*Chemical Engineering and
Analytical Chemistry Department
University of Barcelona*

4th International Conference on Ionic Liquids in Separation and Purification Technology

The International Conference on Ionic Liquids in Separation and Purification Technology (ILSEPT) is held every two years alternating between different countries such as Spain, Canada and Malaysia. It was celebrated for the first time in Sitges (Barcelona, Spain) in 2011 and it has been again celebrated this year in the same location from 8th to 11th September 2019. The event was organized by Elsevier and chaired by Thomas Schubert, from IoLiTec Ionic Liquids Technologies (Germany) and Boelo Schuur from the University of Twente (The Netherlands). ILSEPT gives the opportunity to discuss and share the latest research on the application of ionic liquids in different fields of chemistry. This year, as the interest in deep eutectic solvents is increasing, this topic has been included in the scope of the conference.

The conference was organized during 3 days into 6 plenary lectures, 9 keynotes, 50 oral presentations and 2 poster sessions (Monday and Tuesday) with a total of 100 posters dealing among others with the use of ionic liquids and deep eutectic solvents in analytical separations, extraction and leaching, biotechnology and biorefining, molecular modeling and simulation or membrane separation.

On Sunday afternoon a welcome drink reception gave the starting point of the conference. The scientific program started on Monday at 8:30 h with the welcome session and the plenary lecture "Separation gases with ionic liquids" by Joan Brennecke from the University of Texas, Austin. Then, two parallel sessions were held with several oral presentations. After lunch,

João Coutinho (University of Aveiro, Portugal) presented another plenary lecture entitled "DES-Do they exist? And why should you be concerned about it", in which he introduced the use of deep eutectic solvents in analytical chemistry. On Monday afternoon, the first poster session with around 50 posters was carried out.

On Tuesday the same schedule was followed, with a plenary lecture at 8:30 h presented by Mara Freire (University of Aveiro, Portugal) about the use of ionic liquid for the purification of biopharmaceuticals. Then, as the previous day, the conference was divided into two parallel sessions (biotechnology and analytical separations). Among other topics, the use of chiral ionic liquids in the enantioseparation of a non-protein amino acid by capillary electrophoresis and the study of the interactions taking place in the separation system was presented. After lunch, Jared Anderson from Iowa State University (USA) and Hiroyuki Ohno from Tokyo University of Agriculture and Technology (Japan), presented two plenary lectures devoted to the use of ionic liquid-based gas stationary phases and about the use of ionic liquids forming two phases in water for extractions, respectively. In addition, several

oral presentations and the second session of posters were also held.

On Wednesday, the conference reached its final point and only a morning session was celebrated. As previously days, it started at 8:30 h with a plenary lecture from Isabel Billard (University of Grenoble, France) focusing on the use of ionic liquids on metal extractions followed by two parallel sessions of oral presentations.

Finally, in the closing ceremony, the chairmen consider the possibility to hold next ILSEPT conference in Latin America due to the high number of people from Latin America attending the Congress. To conclude, the 4th International Conference on Ionic Liquids in Separation and Purification Technologies has gathered international research groups to share the main advances on ionic liquids and to open new opportunities of collaborations.

MAIDER GREÑO

*Dept. of Analytical Chemistry, Physical Chemistry,
and Chemical Engineering
Universidad de Alcalá*

Euroanalysis XX Conference

The Euroanalysis XX Conference was organized by the Turkish Chemical Society, and it was held from September 1st to 5th 2019 in Istanbul, Turkey. The meeting was hosted by the Analytical Chemistry Division of the Turkish Chemical Society and the Ankara University and Istanbul University in collaboration with Division of Analytical Chemistry of European Association for Chemical and Molecular Sciences (DAC-EuChemS).

The meeting aimed to cover all aspects of the analytical chemistry, starting from sample preparation to detection and data analysis processing. Different applications in food, metabolomics, environmental, biomedical and pharmaceutical analysis were covered in different plenary and keynote presentations by internationally renowned leaders of the field and by talks and poster presentations. A Young Researcher's Session was also organized to give the opportunity to Ph.D. students and postdocs to share their works and results.

Short training courses started 31st August in the morning in 4 different halls, covering different topics:

chemometrics, biosensors, bioanalysis, ion mobility mass spectrometry, metabolomics, capillary electrophoresis and proteomics. Short courses continued on Sunday morning, and were focused on challenges in analytical development for pharmaceutical industry, enantioseparations, sample preparations and solid phase microextraction and protein purification.

The scientific program of the congress started on Sunday 1st September afternoon. More than 600 participants were registered and followed the first Opening Ceremony by Sibel A. Ozkan, Chair and chief organizer of the congress. Two plenary lectures followed the opening ceremony with 'A short history of analytical chemistry in Turkey' by Prof. Osman Yavuz Ataman and 'Single molecule sensing of clinical biomarkers' by Prof. Luisa Torsi.

The second day, after two plenary lectures in the morning, 4 parallel sessions in separation sciences, education, sensors and chemical analysis took place. During the afternoon, other 4 parallel sessions were

INFORMACIONES

run, covering electroanalysis, chemometrics, omics and atomic spectroscopy.

In general, the congress was full of interesting sessions such as the oral presentation by Domenica Mangraviti on 'High throughput lipidomics analysis by ultra-high performance liquid chromatography combined with a novel dual-filter mass spectral library for identification purpose' and by Nataša Gros on 'What water bodies as a topic have to offer for project-centered cooperative learning at master level'. Other interesting presentations were the keynote lecture by Wolfgang Lindner on 'Enantioselective 2D-LC concepts and their implementation to analyze D-amino acids and other target compounds' and the plenary lecture by Anthony P.F. Turner on 'Smart polymer biosensors'.

Tuesday and Wednesday held 223 posters presentations and 18 sessions with more than 95 platform discussions. Many of the events were focused on separation science, biosensors, bioanalysis, microfluidics, sample preparation and green analytical chemistry and material sciences, among others. Special emphasis was paid to the multidimensional chromatography (gas and liquid chromatography) for the analysis and identification of metabolic compounds, proteins and toxins in human, environmental, and food samples. It was very useful to learn firsthand about new aspects in analytical chemistry, for instance, during the plenary lecture on 'Development and application of matrix compatible coatings for clean selective enrichment

from complex samples' or 'Why smaller is better in extraction?' by Janusz Pawliszyn.

Thursday, after two plenary sessions, was dedicated to the young scientist's oral communications. This was a good opportunity for the students to present their work and to share, even with a very short time, their findings.

The XX Euroanalysis congress finished with a young scientists' award for the best oral communication and poster presentation. Up to 20 students from all over the world were awarded a special prize by Elsevier, the Turkish Chemical Society and the EuChemS Division of Analytical Chemistry. The closing ceremony finished with a dance and a beautiful presentation of the Euroanalysis 2021 to be held in The Netherlands.

We can conclude that Euroanalysis 2019 was a great experience. Not only we had the chance to present our research, but we also enriched our knowledge in different fields of analytical chemistry and expanded our professional network. This experience brought new discussions, ideas and inspiration.

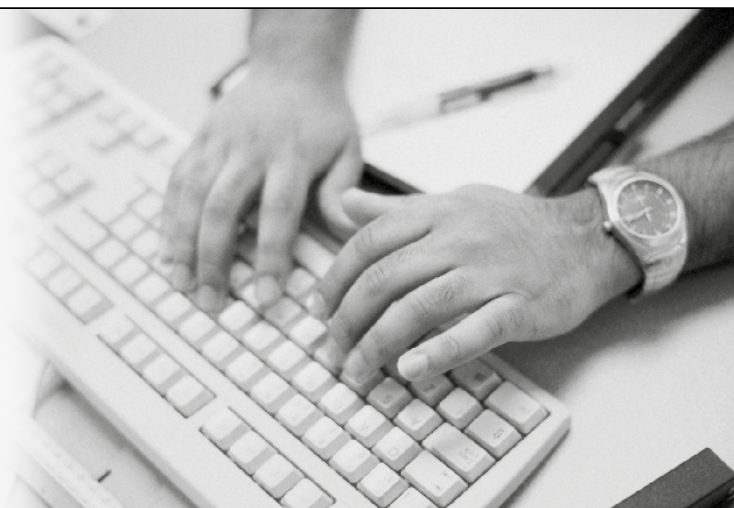
MASSIMO PICARDO Y DANIA FILATOVA

*Water, Environmental and Food
Chemistry (ENFOCHEM)*

*Environmental Chemistry Department
IDAEA (CSIC)*

NOTA DE REDACCIÓN

*Desde el Comité Editorial
os animamos a que nos enviéis
toda aquella información que
consideréis de interés
(premios, jubilaciones, etc.)
para su difusión entre
los lectores del boletín.*



CALENDARIO DE ACTIVIDADES

1. **MSB 2020: 36th International Symposium on Microscale Separations and Bioanalysis**
5-8 de abril de 2020. Saint Malo (Francia)
Chairs: **Serge Rudaz y Myriam Taverna**
<http://www.msb2020.com/>
2. **SETAC Europe 2020. 30th Annual Meeting**
3-7 mayo 2020. Dublín (Irlanda)
Chairs: **Iseult Lynch, Jeremy Piggott y Susana Loureiro**
<https://dublin.setac.org/>
3. **SBCN 2020: 15th International Symposium on Biochromatography and Nanoseparations**
11-14 de mayo de 2020. Nancy (Francia)
Chairs: **Romain Kapel y Xavier Santarell**
<https://www.sbcn2020.com/>
4. **44th International Symposium on Capillary Chromatography & 17th GCxGC Symposium**
24-29 mayo 2020. Riva del Garda (Italia)
Chair: **Prof. Luigi Mondello**
<http://iscc44.chromaleont.it/slider.html>
Congreso patrocinado por la SECyTA
5. **PREP 2020: 33rd International Symposium on Preparative and Process Chromatography**
31 mayo-3 junio 2020. Baltimore (EE.UU.)
Chair: **Giorgio Carta**
<https://www.prepsymposium.org/>
6. **HPLC 2020: 50th International Symposium on High-Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques**
20-25 junio 2020. San Diego (EE.UU.)
Chair: **Mary J. Wirth**
<http://www.hplc2020-usa.org/>
7. **16th annual workshop on emerging high-resolution mass spectrometry (HRMS) and LC-MS/MS applications in environmental analysis and food safety**
22-23 junio 2020. Barcelona (España)
Chair and co-chairs: **Damià Barceló, Mehran Alaei y Mira Petrovic.**
<https://lcmsms.activacongresos.com/>
8. **Metabolomics 2020: 16th International Conference of the Metabolomics Society**
6-10 julio 2020. Shanghai (China)
Chairs: **Huiru Tang y Zheng-Jian Zhu**
<http://metabolomics2020.org/>
9. **IMSC: 23rd International Mass Spectrometry Conference 2020**
29 agosto-4 septiembre de 2020. Rio de Janeiro (Brasil)
Chair: **Marcos Eberlin**
<https://www.imsc2020.com/>
10. **DIOXIN 2020: 40th International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs)**
30 agosto-4 septiembre 2020. Nantes (Francia)
Chair: **Prof. Bruno Le Bizec**
<http://www.dioxin2020.org/>
11. **PBA 2020: 31st International Symposium on Pharmaceutical and Biomedical Analysis**
30 agosto-3 septiembre de 2020. Kioto (Japón)
Chairs: **Jun Haginaka y Kenji Hamase**
<http://soyaku.phar.kyushu-u.ac.jp/PBA2020/index.html>
12. **ISC 2020: 33rd International Symposium on Chromatography**
21-25 septiembre de 2020. Budapest (Hungría)
Chair: **Attila Felinger**
<http://isc2020.hu/>
13. **ExTech 2020: 22nd International Symposium on Advances in Extraction Technologies**
28 septiembre-2 octubre 2020. Cartagena de Indias (Colombia)
Chair: **Milton Rosero Moreano**
<http://extech2020.com/es/>
14. **MicroTAS: 24th International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences**
4-8 octubre 2020. Palm Springs (EE.UU.)
Co-chairs: **Amy E. Herr y Joel Voldman**
<https://microtas2020.org/>

NUEVAS TESIS DOCTORALES



“Enzymatic obtainment of pectin and pectic oligosaccharides from artichoke by-products. Structural characterization and functional evaluation through machine learning”

Autor: **Carlos Sabater Sánchez**

Directoras: Dras. Nieves Corzo Sánchez y Antonia Montilla Corredera.

Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, CIAL (CSIC-UAM). Grupo de química y funcionalidad de carbohidratos y derivados.

Universidad Autónoma de Madrid, 22 de noviembre de 2019.

Resumen:

Esta Tesis Doctoral tuvo por objetivo la extracción y la caracterización de pectina de alcachofa, así como el estudio de la despolimerización enzimática de la misma para obtener mezclas de oligosacáridos pécticos (POS). Además, se evaluó el posible uso de estos productos como ingredientes funcionales estudiando, tanto su comportamiento en una matriz láctea, como su actividad anti-inflamatoria in vivo en un modelo de ratones con colitis inducida por DSS. Con este fin, se optimizó la extracción de pectina de alcachofa utilizando un preparado de celulasa, Celluclast, dando lugar a altos rendimientos. Esta pectina podría ser utilizada como aditivo alimentario (E-440) por su elevado contenido en ácido galacturónico (> 65 %). Otras características estructurales de la pectina de alcachofa extraída fueron su alto contenido en azúcares neutros, especialmente arabinosa, la distribución multimodal de masas moleculares y el bajo grado de metil-esterificación que presentó.

Se comparó la extracción enzimática con la extracción convencional mediante citrato sódico y ácido nítrico, y con la extracción asistida por ultrasonidos en combinación con una celulasa. Este último tratamiento podría ser utilizado para obtener pectina de alcachofa a tiempos más cortos, lográndose buenos rendimientos y sin una modificación estructural importante. Por otra parte, se estudió la obtención de POS a partir de pectina de alcachofa, empleando enzimas con diferentes actividades hidrolíticas, y se compararon los perfiles de POS con aquellos obtenidos a partir de pectinas de cítricos y manzana de alto grado de metil-esterificación. Las enzimas Celulasa de *Aspergillus niger* y Pectinex Ultra Olio dieron lugar a elevados rendimientos de POS.

Para elucidar los perfiles estructurales de las cadenas de pectinas y POS a partir de sus espectros de masas (GC-EI-MS), se desarrolló una nueva estrategia de análisis de datos basada en la combinación de algoritmos de aprendizaje automático y la fragmentación in silico. Este método computacional también se utilizó para caracterizar diversas estructuras de POS liberadas en pequeñas cantidades durante la elaboración de yogures funcionales con pectina y POS de cítricos y alcachofa. Por último, los estudios in vivo revelaron que la pectina de alcachofa redujo la expresión de citoquinas pro-inflamatorias, mostrando una bioactividad mejorada con respecto a la pectina de cítricos. Se establecieron perfiles de expresión mediante redes neuronales artificiales y se observó que el contenido en galactosa de la pectina resultó ser especialmente relevante para conservar su actividad anti-inflamatoria.



“Avances en el análisis de benzimidazoles en muestras alimentarias, medioambientales y clínicas”

Autora: **Carmen Tejada Casado**

Directores: Dra. Monsalud del Olmo Iruela y Dr. Francisco Jesús Lara Vargas.

Grupo FQM 302-“Calidad en Química Analítica Alimentaria, Ambiental y Clínica”, Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada.

21 de diciembre de 2018.

Resumen:

En esta Tesis se han desarrollado diferentes métodos para la determinación de residuos de benzimidazoles (BZs) y otros fármacos de origen veterinario y humano en matrices alimentarias, ambientales y clínicas. En el caso de los alimentos, la legislación europea vigente establece para estos compuestos unos Límites Máximos de Residuos (MRLs) que no deben ser superados con objeto de garantizar la calidad del producto y permitir su distribución y consumo. Por otro lado, la incorporación constante en el medio ambiente de estos residuos sin el debido control está provocando serios problemas en los ecosistemas receptores que obligan al desarrollo de metodologías para su cuantificación y posterior evaluación de riesgos. Además, con el fin de seleccionar la dosis apropiada de un fármaco en un tratamiento clínico, que evite riesgos innecesarios en la salud del animal, también es necesario el uso de métodos analíticos para el control de los principios activos de estos fármacos en fluidos biológicos.

Considerando las recientes e importantes mejoras de las técnicas separativas en cuanto a miniaturización, aumento de la eficacia, alta sensibilidad, elevada resolución y bajo consumo de disolventes y muestra, en esta Tesis Doctoral se propone la utilización de la Electroforesis Capilar (CE) y la cromatografía de líquidos (LC), en sus diversas modalidades, además de la Espectrometría de Movilidad Iónica (IMS), con objeto de explorar las ventajas mencionadas.

Junto con la detección UV/Vis y de Fluorescencia (FL), a lo largo de esta Tesis se ha considerado también la Espectrometría de Masas (MS) debido a las ventajas que aporta como sistema de detección, tales como la elevada sensibilidad, universalidad y capacidad para la identificación inequívoca de los analitos. Además, se ha utilizado IMS acoplada a MS ya que proporciona información complementaria, para la caracterización de compuestos, mediante la estimación del parámetro “sección de colisión transversal” (CCS). Es importante señalar que en esta Tesis Doctoral se presentan, por primera vez la Electro cromatografía Capilar (CEC) con detección UV y CE-MS/MS como poderosas herramientas para la determinación de BZs y sus metabolitos. Además, es la primera vez que muchos de estos residuos y otros fármacos de uso humano y veterinario han sido caracterizados en términos de CCS, haciendo uso de la IMS-MS. Igualmente, se han propuesto tratamientos de muestra rápidos, simples y poco contaminantes con el objetivo de alcanzar una alta eficacia en la extracción y un adecuado tratamiento de muestra.

NUEVAS TESIS DOCTORALES



“Avances en cromatografía de gases para el análisis de microcontaminantes orgánicos persistentes en mezclas complejas”

Autor: **Juan Escobar Arnanz**

Directora: Dra. Lourdes Ramos Rivero

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

Universidad Complutense de Madrid, 5 de noviembre de 2019.

Resumen:

La cromatografía de gases (GC) es una de las técnicas más aplicadas y aceptadas para la determinación de compuestos orgánicos de volatilidad alta o media en mezclas complejas por su elevada capacidad de resolución. Sin embargo, a medida que aumenta la complejidad de las muestras y disminuye el nivel de concentración de los analitos, la posibilidad de coelución se incrementa y, en consecuencia, la necesidad de aumentar la selectividad y sensibilidad del proceso de separación-detección también aumenta. Un caso en el que este hecho resulta particularmente evidente es el análisis de residuos de contaminantes orgánicos persistentes, debido al elevado número de componentes de algunas de estas familias de compuestos regulados y la posibilidad de interferencia mutua, tanto intra- como inter-grupo.

El objetivo central de esta tesis era avanzar en el estado actual de los conocimientos en el campo de la GC, tanto en su formato monodimensional como de cromatografía de gases completa en dos dimensiones (GC × GC), aportando nuevas soluciones y estrategias analíticas de utilidad para la determinación de contaminantes organohalogenados y aromáticos en muestras complejas ambientales y de alimentos.

El primer bloque de estudios abordados en el marco de esta tesis incluía la evaluación y caracterización de una nueva serie de fases estacionarias de GC basadas en líquidos iónicos (ILs), empleando como compuestos modelo una mezcla que contenía 153 congéneres de bifenilos policlorados (PCBs) pertenecientes a distintos grupos de homólogos y con distinto tipo de sustitución. En esta parte del trabajo se empleó GC acoplada a detectores como el de micro-captura electrónica o el de espectrometría de masas (MS) cuadrupolar. Los resultados obtenidos con las fases basadas en ILs se compararon con los proporcionados por una variedad de fases estacionarias comerciales de menor polaridad. Esta parte de la investigación se completó con el desarrollo de un modelo estadístico basado en descriptores topológicos que permitía predecir la retención de los analitos modelo en distintas fases de GC incluyendo, por primera vez, las basadas en ILs, y que además podía ser aplicado bajo distintas condiciones de trabajo (es decir, tanto en condiciones isotermas como de temperatura programada).

La segunda parte de la tesis pretendía determinar el potencial de la GC × GC acoplada a MS de tiempo de vuelo (GC × GC-ToF MS) para la determinación de la carga total de contaminantes organohalogenados y aromáticos presentes en muestras ambientales complejas, incluyendo tejidos biológicos, suelos y ceniza. Estos estudios han evidenciado el gran potencial de la GC × GC-ToF MS en este campo de investigación, al proporcionar información, en un único análisis no orientado (ómico), sobre el conjunto de los analitos de este tipo presentes en los extractos analizados, incluyendo contaminantes regulados y emergentes conocidos (target analysis), pero también productos de descomposición/degradación de los mismos (suspect and retrospective analysis), y otros compuestos sobre los que no existía sospecha (non-target analysis) y no caracterizados con anterioridad (unknowns).



“Estrategias Analíticas Avanzadas de obtención y análisis de compuestos bioactivos en muestras de origen vegetal”

Autora: **María Jesús García Sarrió**

Directoras: Dras. Ana Cristina Soria y María Luz Sanz

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

Universidad Complutense de Madrid, 11 de noviembre de 2019.

Resumen:

El objetivo principal de esta Tesis ha sido el desarrollo de nuevas metodologías avanzadas basadas en la extracción asistida por microondas (MAE) o por ultrasonidos (UAE) y en la extracción con líquidos presurizados (PLE), para la obtención de extractos multifuncionales, así como la caracterización de estos extractos mediante cromatografía de gases y de líquidos acopladas a espectrometría de masas (CG-MS y LC-MS), y la evaluación de sus propiedades bioactivas, estabilidad y seguridad para dos matrices vegetales: corteza de abedul (*Betula sp.*) y hojas de menta (*Mentha sp.*).

La medida de la actividad antilipasa y antioxidante, la evaluación de la estabilidad y la viabilidad celular de los extractos MAE de corteza de abedul obtenidos en las condiciones previamente optimizadas, puso de manifiesto su potencial como ingredientes multifuncionales estables y seguros. El análisis de los extractos de distintas especies de abedul permitió determinar 22 compuestos (terpenoides con estructura tipo lupano, compuestos fenólicos, etc) con una elevada variabilidad a nivel cuantitativo en función de la especie considerada. Estos estudios subrayan la utilidad de la MAE como metodología rápida y eficaz para la revalorización de este residuo de la industria maderera como una nueva fuente de ingredientes bioactivos de aplicación en distintos campos.

Respecto a la obtención de extractos de hojas de *Mentha sp.*, tanto MAE como PLE resultaron ser técnicas ventajosas en cuanto a rendimientos y reproducibilidad (en comparación con SLE y UAE) para la extracción de compuestos bioactivos (terpenoides y/o compuestos fenólicos). El análisis por GC-MS de los extractos etanólicos obtenidos permitió determinar 46 compuestos, principalmente terpenoides (monoterpenos, monoterpénos oxigenados, sesquiterpenos, etc), e isómeros del neofitadieno, estos últimos descritos por primera vez en estos extractos. El análisis por LC-MS/MS de los extractos acuosos de hojas de menta permitió la caracterización de 43 compuestos fenólicos y la cuantificación de los mayoritarios. Los estudios de bioactividad demostraron que todos los extractos MAE poseían actividad antioxidante, presentando la mayoría de los extractos acuosos actividad moderada frente a *Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli* y siendo ésta diferente en función de la especie de menta considerada. Es de destacar que ésta es la primera vez que se lleva a cabo una caracterización exhaustiva sobre la composición y actividad de extractos MAE de *Mentha sp.*

Los resultados multidisciplinares aquí descritos, suponen una contribución destacable al desarrollo de nuevos ingredientes alimentarios, conservantes naturales, etc. de aplicación en diversos campos dentro de un marco de producción sostenible, tema éste de gran repercusión científica, económica y social.

ARTÍCULOS DE INTERÉS

Análisis de bisfenol A y sus sustitutos mediante cromatografía de gases y de líquidos acopladas a espectrometría de masas en diversas matrices

Los bisfenoles (BPs) forman un grupo de compuestos orgánicos caracterizados por tener dos grupos fenólicos en su estructura. Dentro de este grupo, el más conocido es el bisfenol A (BPA, 2,2-bis(4-hydroxyphenyl)propane), ya que ha sido, y continúa siendo, el más usado como monómero en la fabricación de plásticos de policarbonato y resinas epoxi. Su amplio uso abarca, por ejemplo, el recubrimiento interno en la producción de latas de conserva, envases de plástico para alimentos y bebidas, como sellador dental o en papel térmico. Como consecuencia de esas aplicaciones, se ha detectado en diferentes matrices ambientales, alimentos o muestras biológicas humanas, lo que ha permitido observar distintos efectos tóxicos relacionados con él. Se le considera un disruptor endocrino del que se ha evidenciado su carácter estrogénico débil. Sus efectos adversos incluyen la alteración de la función reproductora, la feminización de numerosas especies animales e incluso se le ha relacionado con el cáncer de mama humano. También se le asocia con enfermedades cardiovasculares, diabetes mellitus tipo 2, resistencia a la insulina y obesidad. Por estas razones, tanto su producción como su uso han sido objeto de regulación en muchos países. Así, la Agencia para la Protección del Medio Ambiente de los Estados Unidos (USEPA) estableció en 1993 un límite de ingestión de 50 µg/kg peso corporal/día o, mucho más recientemente, en 2015, la Autoridad de Seguridad Alimentaria Europea (EFSA) lo fijó en 4 µg/kg peso corporal/día. Además, su uso en la fabricación de biberones para lactantes ha sido prohibido en Canadá (2008), Francia (2010) o la Unión Europea (2011). De igual forma, la UE añadió en 2016 el BPA a la lista de sustancias restringidas con la consiguiente prohibición de su uso en papeles térmicos en concentraciones superiores al 0,02 % a partir de enero de 2020, lo que ha sido un acicate en el empleo de los sustitutos de BPA.

La preocupación por la toxicidad asociada al BPA ha conducido a la síntesis de otros compuestos de estructura química similar para proceder a su susti-

tución paulatina en diferentes áreas de aplicación. A estos nuevos compuestos se les conoce genéricamente como sustitutos o análogos del BPA. Entre ellos, se pueden citar el BPS (4,4'-sulfonyldiphenol), BPF (4,4'-dihydroxydiphenylmethane), BPAF (4,4'-(hexafluoroisopropylidene)diphenol), BPAP (4,4'-(1-phenylethylidene)bisphenol), BPB (2,2-bis(4-hydroxyphenyl)butane), BPP (4,4'-(1,4-phenylenediisopropylidene)bisphenol), BPZ (4,4'-cyclohexylidenebisphenol), BPE (1,1-Bis(4-hydroxyphenyl)ethane), BPC (2,2-Bis(4-hydroxy-3-methylphenyl)propane), BPAF (4,4'-(hexafluoroisopropylidene)diphenol) o BPAP (4,4'-(1-phenylethylidene)bisphenol). Aunque en principio se consideraron alternativas menos tóxicas, con el tiempo, se ha demostrado que algunos de ellos muestran, incluso, una genotoxicidad superior a la del BPA en células de carcinoma hepático humano (BPF y BPAF), se les relaciona con la obesidad en niños y adolescentes (BPA, BPF y BPS), o reducen la secreción de testosterona en explantes testiculares de adultos (BPB).

Es por todo esto que existe un interés creciente en el análisis del BPA y sus sustitutos, así como en la necesidad de estudiar la exposición a estos compuestos mediante su determinación en diferentes matrices sospechosas de contener niveles significativos de estos BPs. Hasta el momento, tanto el BPA como sus sustitutos se han encontrado en matrices muy variadas, tales como aguas superficiales, lodos de depuradoras de aguas residuales, polvo de interior, papeles térmicos o en tejidos o fluidos de seres humanos. Para su determinación, la técnica instrumental más comúnmente usada es la cromatografía de líquidos (LC), aunque también se ha empleado la cromatografía de gases (GC), previa derivatización, ambas acopladas a espectrometría de masas (MS).

A continuación, se presentan tres artículos que muestran la determinación del BPA y distintos sustitutos en tres tipos de matrices distintos, como son aguas superficiales y residuales, papel térmico y orina humana.

“The occurrence of contaminants of emerging concern in Slovenian and Croatian wastewaters and receiving Sava river”.

Marjeta Česen, Marijan Ahel, Senka Terzić, David John Heath, Ester Heath. *Science of the Total Environment* 2019, 650, 2446-2453.

En este trabajo, los autores llevan a cabo un estudio sobre 48 contaminantes emergentes (ECs), 15 de los cuales son BPs, en efluentes recogidos en 6 plantas de tratamiento de aguas residuales (3 en Eslovenia y 3 en Croacia) que afectan directamente a los cursos medio y alto del río Sava, así como en 7 puntos del propio río previos o posteriores a las descargas de las plantas de tratamiento de aguas residuales (3 en Eslovenia y 4 en Croacia). Las muestras se tomaron en los periodos de mayo y julio de 2017. Los autores proponen abordar un estudio de riesgo ambiental a partir de las concentraciones encontradas.

Los 15 BPs analizados han sido BPA, BPAF, BPAP, BPC, BPE, BPF, BPFL, BPM, BPBP, BPP, BPS, BPZ, BPB, BPCl₂ y BPPH. Las muestras (1 mL), una vez filtradas por un filtro de microfibras de vidrio y otro de nitrato de celulosa (0,45 µm), se almacenaron a -20 °C hasta su análisis. Posteriormente, las muestras se sometieron a una extracción en fase sólida (SPE) empleando cartuchos Oasis HLB Prime y se eluyeron con 1800 µL de una solución 5 % de ácido fórmico/acetato de etilo (para las aguas superficiales) o de 5 % de amoníaco/metanol para los efluentes. Una vez evaporado el disolvente, se procedió a su derivatización previo a su análisis por cromatografía de gases. Los extractos secos se subdividieron en dos partes, siendo una de ellas la que se emplearía para el análisis de los BPs. Esta muestra fue derivatizada empleando 50 µL de N-metil-N-(trimetilsilil) trifluoroacetamida (MSTFA) en 50 µL de piridina a 60 °C durante 1 hora.

Las muestras se analizaron mediante GC-qMS empleando una columna DB-5 MS (30 m × 0,25 mm i.d., 0,25 µm film), Helio como gas portador, inyección splitless a 250 °C y ionización electrónica (70 eV). El modo de adquisición fue mediante registro selectivo de iones (SIM), empleando el patrón marcado isotópicamente BPA-d₁₆ para la cuantificación por dilución isotópica. El tiempo total de análisis fue inferior a los 40 minutos. Los resultados obtenidos muestran niveles detectables y cuantificables de BPA, BPB, BPE, BPF y BPS en aguas residuales (medias entre 27,1 y 316 ng/L) y BPA, BPP, BPS, BPZ, BPAP y BPCl₂ en aguas su-

perficiales (0,70 – 61,5 ng/L), algunos de los cuales se han detectado en por primera vez en Europa. Según la evaluación del riesgo ambiental que los autores hacen a partir de los resultados obtenidos, sólo el BPB podría representar un riesgo de tipo medio de acuerdo a su concentración en aguas superficiales.

“Determination of bisphenol A and bisphenol S concentrations and assessment of estrogen- and anti-androgen-like activities in thermal paper receipts from Brazil, France, and Spain.”

J. M. Molina-Molina, I. Jiménez-Díaz, M. F. Fernández, A. Rodríguez-Carrillo, F. M. Peinado, V. Mustieles, R. Baroukid, C. Piccolie, N. Olea, C. Freire. *Environmental Research*, 2019, 170, 406-415.

A pesar de los efectos negativos ya indicados para el BPA, uno de sus usos más extendidos es como revelador de color en el papel térmico. Al encontrarse en la superficie de impresión en su forma no polimerizada, el BPA puede entrar en contacto con la piel y ser absorbido por nuestro organismo. Debido a la amplísima utilización de este tipo de papel en los recibos de gran variedad de establecimientos, la EFSA ha puesto el foco sobre el BPA, ya que el papel térmico se ha convertido en la segunda vía más importante de la exposición humana (tras la ingestión oral) para todos los grupos de población de más de 3 años a través de la absorción dérmica y el contacto entre la boca y las manos.

Con el fin de tener una idea de los niveles de este compuesto y de sus sustitutos BPF y BPS en los papeles térmicos, los autores de este trabajo recogieron muestras de distintos tipos de papel en bancos, supermercados, restaurantes, tiendas de ropa y cosméticos, transporte público, tiendas de bricolaje, farmacias y gasolineras de Brasil, Francia y España.

Las 112 muestras de papel (20 mg) se extrajeron con acetonitrilo durante 10 minutos utilizando un baño de ultrasonidos. 300 µL del extracto se transfirieron a un vial, se diluyeron con agua Milli-Q y se analizaron mediante LC-MS con una interfase de electrospray (ESI) en modo negativo. Para ello, se usó una columna de C₁₈ (100 mm × 2 mm, 3 µm) y la separación se llevó a cabo en condiciones de gradiente con una fase móvil compuesta por una solución de 0,025 % de amoníaco en agua (fase A) y en acetonitrilo (fase B). El flujo de trabajo se fijó en 0,5 mL/min y la temperatura de la columna en 25 °C.

INFORMACIÓN BIBLIOGRÁFICA

El analizador de cuadrupolo que se empleó para la detección y cuantificación operó en modo de selección de iones (SIM) mediante el registro de m/z 227 (BPA), m/z 199 (BPS) y m/z 249 (BPF). El BPA fue detectado entre el 50 y el 100 % de las muestras analizadas, con medianas que oscilaron entre 4,68 y 13,21 mg/g de papel, según el origen del mismo. El BPS no se detectó en tres categorías (transporte público, gasolineras y otros), mientras que en el resto osciló entre el 8 y el 33,3 % de las muestras analizadas, con concentraciones que variaban entre el LOD y 13,29 mg/g. En ningún caso se detectó BPF.

La valoración de la toxicidad asociada a esos niveles de BPA y BPS se hizo mediante bioensayos específicos: E-Screen para la toxicidad (anti)estrogénica y el de la luciferasa para la (anti)androgénica. Según los ensayos realizados, parece derivarse un efecto estrogénico y antiandrogénico a partir de los niveles de BPA detectados.

“Urinary bisphenol analogues concentrations and biomarkers of oxidative DNA and RNA damage in Chinese school children in East China: A repeated measures study”

Ying Zhou, Yuan Yao, Yijun Shao, Weidong Qu, Yue Chen, Qingwu Jiang. *Environmental Pollution*, 2019, 254, 112921.

Este trabajo se centra en un estudio de biomonitorización de los niveles de BPA y 8 análogos del mismo en 818 muestras de orina de una cohorte de niños de entre 7 y 11 años en la parte oriental de China para valorar su exposición, así como el posible daño

oxidativo derivado en el ADN y el ARN. En total, se determinaron los niveles en orina de BPA, BPB, BPAF, BPAP, BPE, BPF, BPP, BPS y BPZ.

Se partió de 1,0 mL de orina que se incubó con β -glucuronidasa a 37 °C para hidrolizar los conjugados de los analitos. A continuación, éstos se extrajeron mediante el empleo de cartuchos Oasis MAX con acetato de etilo, se concentraron y trasvasaron a vial usando metanol. El análisis instrumental se llevó a cabo mediante UHPLC-MS/MS, utilizando una columna BEH C_{18} (100 mm \times 2,1 mm, 1,7 μ m), usando un gradiente de agua y metanol con 0,1 % de amoníaco en ambos como fase móvil, con un flujo de 0,2 mL/min.

Como sistema de detección se empleó un espectrómetro de masas con analizador de Triple Cuadrupolo utilizando una interfase de ESI negativo. La adquisición se llevó a cabo en monitorización de múltiples reacciones (MRM). La cuantificación se hizo mediante la técnica de la dilución isotópica empleando patrones marcados isotópicamente de BPA- d_4 , BPF- d_{10} , BPS- $^{13}C_{12}$ y BPAF- $^{13}C_{12}$.

Los BPs detectados fueron BPA, BPS, BPF y BPAF, mientras que del resto de BPs no hubo resultados positivos en ninguna de las muestras analizadas. Estos niveles se asociaron positivamente con los biomarcadores de daño oxidativo 8-OHdG y 8-OHG en el caso del BPA o sólo de este último en el caso del BPS, lo que, según los autores, sugiere que la exposición a bisfenoles causa daño oxidativo en el RNA.

MARIO FERNÁNDEZ MARTÍN

Instituto de Química Orgánica General (CSIC)



EMPRESAS colaboradoras

PROTECTORAS

- AGILENT TECHNOLOGIES SPAIN, S.L.
Parque Empresarial Alvia
José Echegaray, 8. Edif. 3, Planta 1.ª
28232 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)
- SCIEX SPAIN, S.L.
Valgrande, 8
Edificio Thanworth II, Nave B1A
28108 ALCOBENDAS (Madrid)
- TEKNOKROMA ANALÍTICA, S.A.
Camí de Can Calders, 14
08173 Sant Cugat del Vallès BARCELONA
- THERMO FISHER SCIENTIFIC
Avda. de la Vega, n.º 1. Edif. 1 Planta 4
28108 ALCOBENDAS (Madrid)
- WATERS CROMATOGRAFÍA, S.A.
Ronda Can Fatjó, 7-A
Parc Tecnològic del Vallès
08290 CERDANYOLA DEL VALLÈS (Barcelona)

ASOCIADAS

- BIOTECH AB
Råövågen 300
439 92 ONSALA
Sweden
- INGENIERÍA ANALÍTICA, S.L.
Avda. Cerdanyola, 73
08172 SANT CUGAT DEL VALLÈS (Barcelona)
- IZASA SCIENTIFIC, S.L.U.
Plaza de Europa, 21-23
08908 L'HOSPITALET DE LLOBREGAT
(Barcelona)
- LECO INSTRUMENTOS, S.L.
Avda. de la Industria, 43
28760 TRES CANTOS (Madrid)
- SCHARLAB, S.L.
Gato Pérez, 33
Polígono Industrial Mas D'en Cisa
08181 SENTMENAT (Barcelona)
- SCION INSTRUMENTS IBÉRICA
Forjadores, 16
28660 BOADILLA DEL MONTE (Madrid)
- SYMTA, S.L.L.
San Máximo, 31
28041 MADRID
- SUGELABOR
Sicilia, 36
28038 MADRID



A RAPID AND SENSITIVE REVERSE PHASE LC-MS/MS METHOD FOR THE QUANTITATION OF HALOACETIC ACIDS IN DRINKING WATER

Using the SCIEX QTRAP® 6500+ LC-MS/MS System

Tai Siew Hoon SCIEX, Singapore

Drinking water is typically purified using many steps prior to human consumption. Disinfection, such as chlorination, is often one of these steps and is used to remove waterborne microorganisms and to prevent any further growth during water transit. However, as a byproduct of this disinfection process, haloacetic acids (HAA) can form when halogens react with naturally occurring organic matter in the water. Because severe health effects have been linked with long-term exposure to HAAs, many municipalities now limit the maximum HAA levels allowable in their drinking water.

Although minimizing HAAs is essential, it cannot be done at the expense of the disinfection process. Thus, HAAs are typically controlled through careful adjustment of water treatment conditions. The specific HAAs that form are highly dependent upon these conditions such as pH, organic matter, and temperature. As such, HAAs are often tracked and described as groups of compounds. For example, HAA3 is composed of bromodichloroacetic acid, dibromochloro-



acetic acid, and tribromoacetic acid, HAA5 is composed of monochloroacetic acid, dichloroacetic acid, trichloroacetic acid, monobromoacetic acid, and dibromoacetic acid.

Many assays have been developed for the detection of HAAs in drinking water. For example, EPA 552.1, 552.2, and 552.3 use GC-ECD with multiple extraction and derivatization steps. These assays have good sensitivity but take many hours to complete. The EPA 557 method is an IC-MS/MS method, and while it eliminates the liquid-liquid extraction and labor intensive derivatization steps for GC, it still requires an hour to complete.

Because HAAs are highly hydrophilic, reverse phase LC-MS/MS methods have historically been challenging. Assays tend to be highly dependent upon pH conditions or lack sensitivity. Additionally, because of their low mass, MS spectra of HAAs can be subjected to high background and limited choice of fragment ions for MRM analysis. Thus, there is a need to develop a robust and rapid LC-MS/MS method using reversed phase LC with minimal sample preparation and sufficient sensitivity to detect HAAs down to 5 ng/mL.

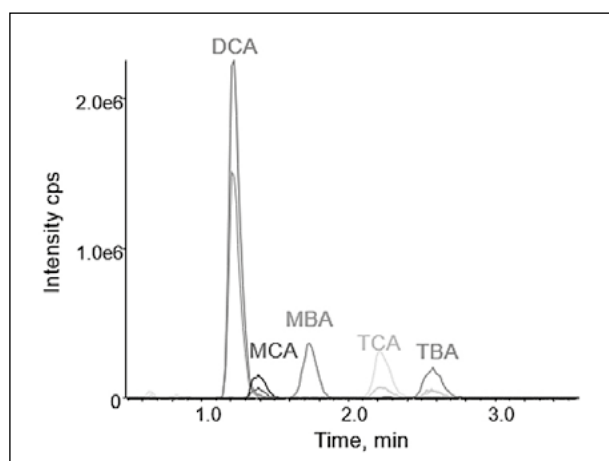


Figure 1. Rapid LC-MS/MS Analysis of HAAs in Drinking Water. The extracted ion chromatograms for 5 HAAs are shown for 50 ng/mL. Total run time is 12.5 minutes, including the wash step. Detection levels down to 1 ng/mL are achieved.

Key Features for HAA Quantitation using the QTRAP 6500+ System

- Water samples are injected directly on column. No need for extensive sample preparation.
- The rapid 12.5 min run time increases sample throughput and minimizes costs from consumables (e.g., mobile phases).
- The QTRAP 6500+ system enables high sensitivity, negative ion MRM acquisition with the ability to perform highly sensitive MS/MS confirmation during assay design.

- The rugged and robust LC-MS/MS assay enables HAA LOQs down to 1 ng/mL meeting all regulatory requirements.

Methods

Sample Preparation: Haloacetic acid standards were prepared at concentrations ranging between 1 ng/mL to 50 ng/mL in ultrapure water and included:

- MCA: monochloroacetic acid, ClCH_2COOH .
- DCA: dichloroacetic acid, Cl_2CHCOOH .
- TCA: trichloroacetic acid, Cl_3CCOOH .
- MBA: monobromoacetic acid, BrCH_2COOH .
- TBA: tribromoacetic acid, Br_3CCOOH .

Chromatography: A Shimadzu LC30 series LC was used with a Synergi Hydro-RP (2.0 × 150mm, 4 μ) column (Phenomenex) at a temperature of 40 °C and a flow rate of 450 $\mu\text{L}/\text{min}$. A 20 μL volume was injected on column for both standard curve generation and measurement of spiked samples. Gradient conditions are listed in Table 1.

Mass Spectrometry: A SCIEX QTRAP 6500+ system was used in negative ion MRM mode for detection and quantitation of HAAs. Optimum MS conditions required a low source temperature and voltage with the following settings: CUR 30, CAD 10, IS -2000, TEM 250, GS1 70, GS2 50.

Table 1. LC Gradient for HAA Analysis.

Time	%A	%B
1.0	99.9	0.1
3.0	95.0	5.0
5.0	10.0	90.0
7.5	10.0	90.0
7.6	99.9	0.1
12.5	99.9	0.1

Mobile phase A: 0.1 % formic acid.

Mobile phase B: 0.1 % formic acid in methanol.

Assay Development

Because chlorine and bromine have multiple isotopes that are highly abundant, MRM transitions were de-

signed using all major precursor isotopes. The multiple MRMs also served as added confidence in detection. Tribromoacetic acid exhibited strong ions due to loss of various portions of the molecule, thus these precursor ions were also used for Q1. Figures 2 and 3 show the structures of trichloroacetic acid and tribromoacetic acid and the precursors used for Q1.

HAAs are highly hydrophilic and as such, are difficult to retain on reversed phase columns. Additionally, columns that retain mono-halogenated HAAs, may exhibit less ability to retain the more polar tri-halogenated HAAs. In this study, the Synergi Hydro-RP column showed good performance for all HAAs. This column is a polar end-capped C18 column that provides superior hydrophobic/hydrophilic reversed phase retention under highly aqueous conditions and improved selectivity for polar compounds. Figure 1 shows the extracted ion chromatograms for the 5 HAAs spiked into ultrapure water at concentrations of 1 and 10 ng/mL. All HAAs elute between 1 and 3 minutes with the total time for the assay 12.5 minutes including the wash step.

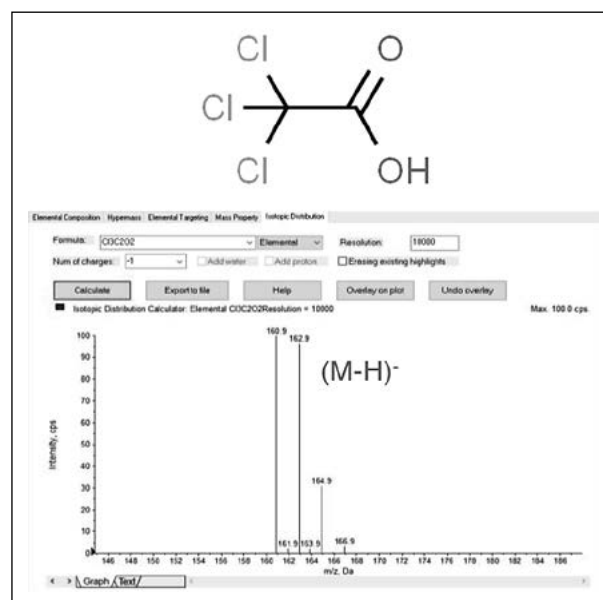


Figure 2. Theoretical MS Spectra for Trichloroacetic Acid. Negative ion mode analysis of trichloroacetic acid (structure at top) produces strong $[\text{M}-\text{H}]^-$ ions.

Sensitive Detection to 1 ng/mL

For determination of the limits of quantitation (LOQ), standards were prepared between 1 and 50 ng/mL

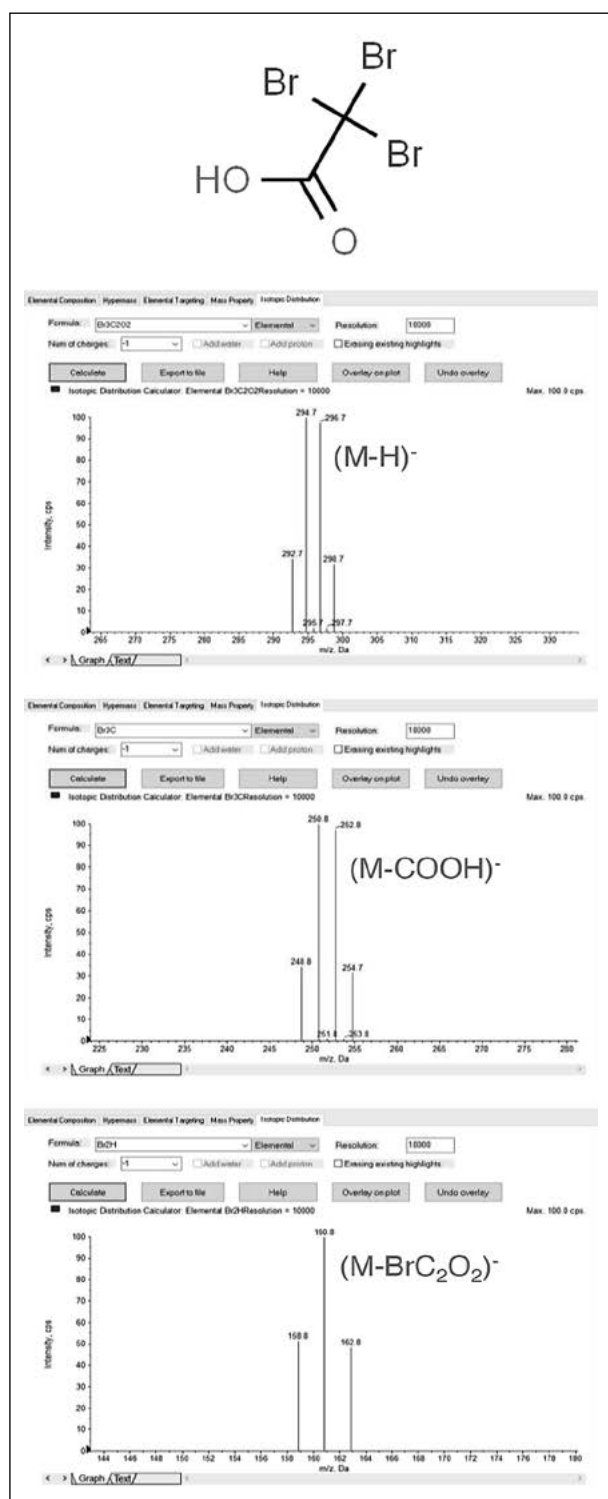


Figure 3. Theoretical MS Spectra for Tribromoacetic Acid. Negative ion mode analysis of tribromoacetic acid (structure at top) produces strong ions resulting from loss of H, loss of COOH, and loss of BrC₂O₂. MRM transitions were designed to monitor fragment ions produced from all three of these precursor ions.

and injected on column. Three injections were made for each concentration. High precision and accuracy were achieved across the concentration range for all HAAs. Figure 4 shows the data for the generation of the standard curve for dichloroacetic acid, with an r^2 value of 0.99.

Figure 5 shows the extracted ion chromatograms for all MRM transitions for all HAAs at the 1 ng/mL concentration level. Good signal-to-noise (S/N) is observed for most transitions. However several transitions suffered from high background. For example, two of the transitions for trichloroacetic acid and one for bromoacetic acid all suffered from high background that obscured the HAA analyte at low concentration levels. For these analytes, the other transitions that were used for the same HAA exhibited good S/N and could be used for quantitation.

Figures 6 and 7 show the extracted ion chromatograms and calculated concentrations for duplicate injections of two samples, A and B, spiked with unknown concentrations of HAAs. As shown, the calculated concentrations for the HAAs for sample A were about 1 ng/mL whereas the concentrations for sample B were about 10 ng/mL which were in agreement with the actual concentrations that were spiked into the samples (1 ng/mL and 10 ng/mL).

Conclusions

A QTRAP 6500+ system and a Phenomenex Synergi Hydro-RP column were used to create a rapid, sensitive, high throughput, and robust negative ion mode LC-MS/MS assay for the quantitation of HAAs in drinking water.

- Detection limits down to 1 ng/mL could be achieved for all monitored HAAs making the assay sensitive enough to surpass regulatory requirements.
- No sample preparation was required and samples could be injected directly on column.
- The rapid analysis time (12.5 minutes) in combination with direct injection (no sample prep required) resulted in a high throughput assay.
- The multiple transitions afforded additional confidence and assay robustness, especially at low concentrations.

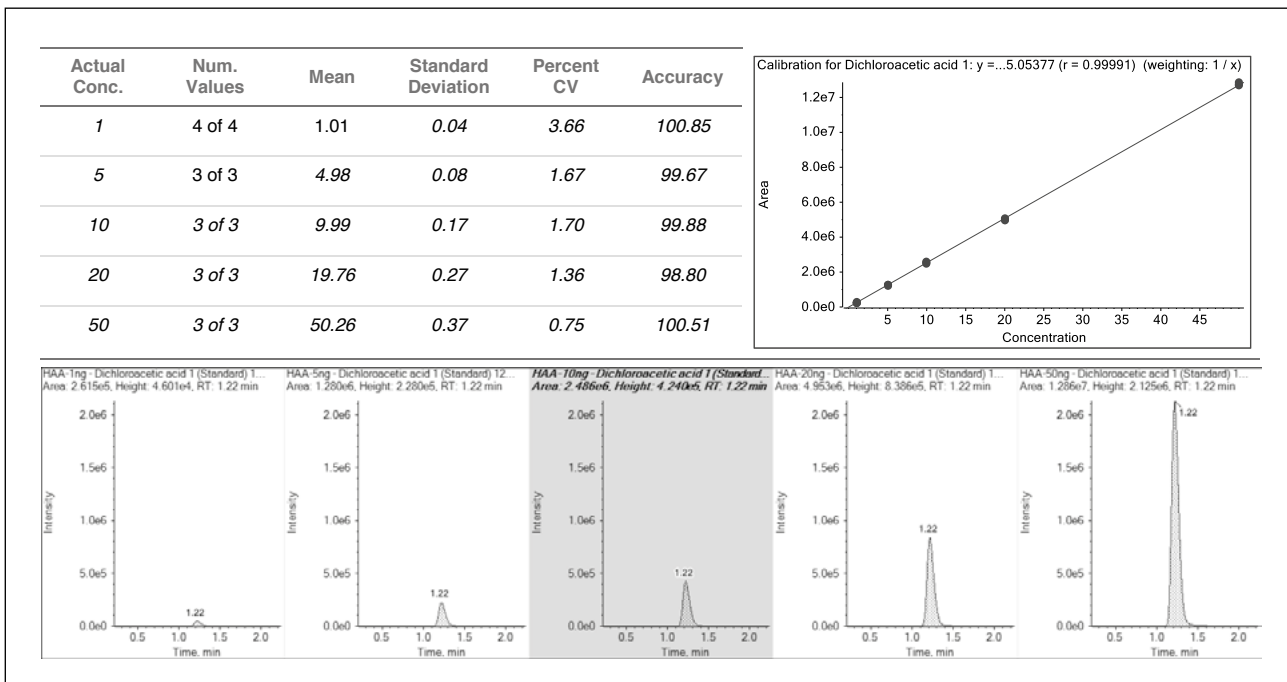


Figure 4. Standard Curve Data for Dichloroacetic Acid. The top left shows the high precision and accuracy achieved for the concentrations of dichloroacetic acid used for generation of the standard curve shown in the top right. Negative ion extracted ion chromatograms are shown for the MRM transitions used for quantitation of this HAA (shown left to right – 1 ng/mL, 5 ng/mL 10 ng/mL, 20 ng/mL, 50 ng/mL).

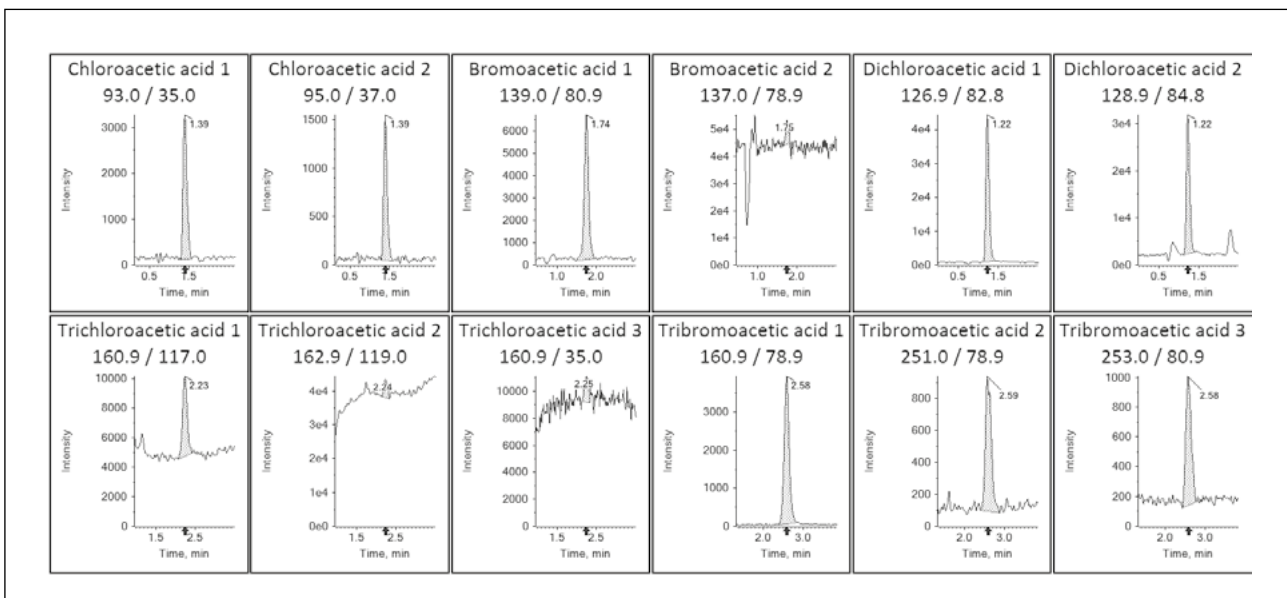


Figure 5. Sensitivity at 1 ng/mL for Five Haloacetic Acids. Extracted ion chromatograms are shown for all HAA MRM transitions at 1 ng/mL concentration.

NOTAS TÉCNICAS

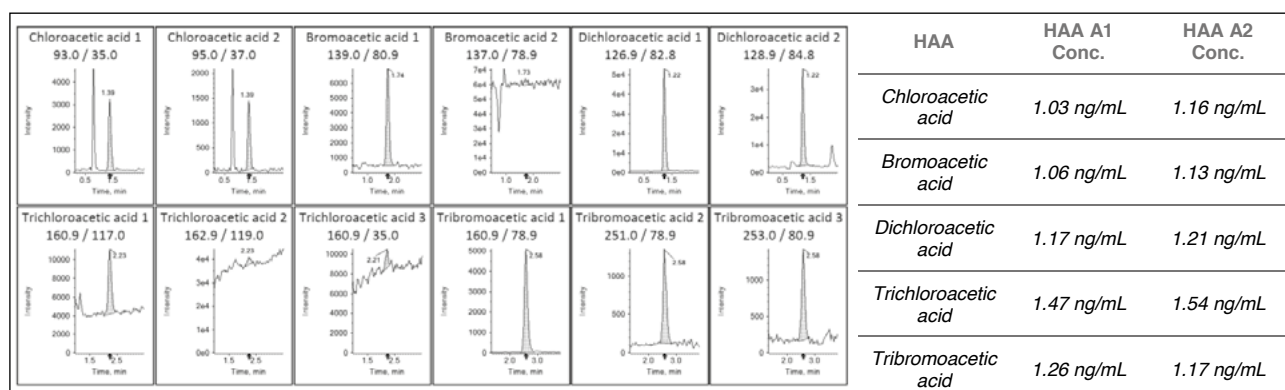


Figure 6. Unknown Spiked Sample A Data. Extracted ion chromatograms (XICs) are shown for all HAA MRMs for unknown spiked sample A. The table displays the calculated concentrations for 2 replicate injections.

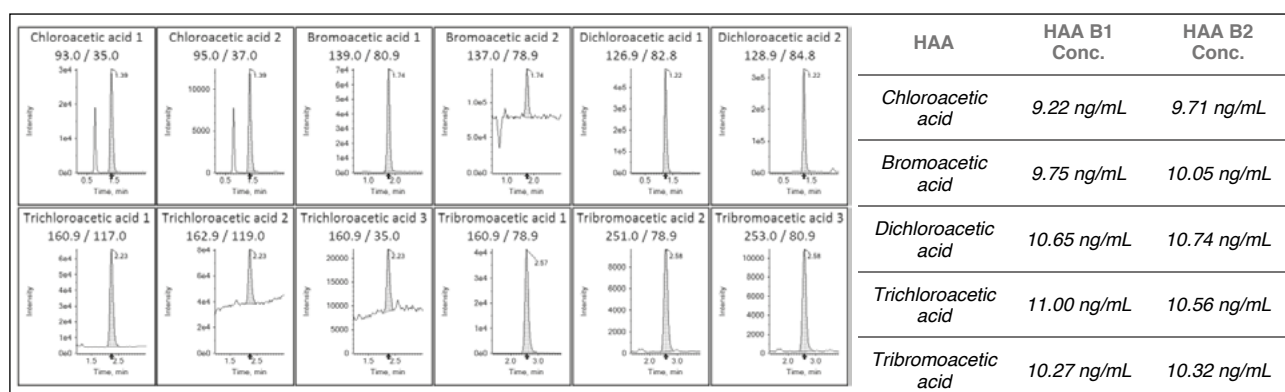


Figure 7. Unknown Spiked Sample B Data. Extracted ion chromatograms (XICs) are shown for all HAA MRMs for unknown spiked sample B. The table displays the calculated concentrations for 2 replicate injections.

For Research Use Only. Not for use in Diagnostic Procedures. Trademarks and/or registered trademarks mentioned herein are the property of AB Sciex Pte. Ltd., or their respective owners, in the United States and/or certain other countries.

AB SCIEX™ is being used under license. © 2019 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. Document number: RUO-MKT-02-10430-A.



Headquarters
 500 Old Connecticut Path | Framingham,
 MA 01701 USA
 Phone 508-383-770
 Sciex.com

International Sales
 For our office locations please call the division
 headquarters or refer to our website at
 sciex.com/offices

XX SCIENTIFIC MEETING

OF THE SPANISH SOCIETY OF CHROMATOGRAPHY AND RELATED TECHNIQUES

PALACIO DE EXPOSICIONES Y CONGRESOS CABO DE GATA CIUDAD DE ALMERÍA
ALMERÍA 6TH-8TH OCTOBER 2020

SECYTA
2020

SAVE
THE DATES

SECYTA

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE
CROMATOGRFÍA
Y TÉCNICAS AFINES



UNIVERSIDAD
DE ALMERÍA



ALMERÍA
CIUDAD

ThermoFisher SCIENTIFIC

DETECTOR DE AEROSOL CARGADO THERMO SCIENTIFIC DIONEX CORONA VEO

Detecta aquello que otros detectores universales no ven

Introducción

No existe un detector para cromatografía de líquidos (LC) que proporcione resultados ideales. Quizás la característica más deseada en un detector es la capacidad de analizar de forma exacta y precisa un amplio rango de compuestos con una respuesta consistente y uniforme para todos ellos.

Habitualmente, un analito responde más que otros, o simplemente no responde nada en un detector particular. El detector UV requiere que la molécula contenga un cromóforo y la respuesta entre analitos varía ampliamente según la naturaleza del cromóforo presente. El detector de índice de refracción no puede utilizarse en elución en gradiente y es sensible a la temperatura. La espectrometría de masas sólo puede analizar compuestos que formen iones en fase gas. Y el detector evaporativo de dispersión de luz muestra variación en la respuesta entre analitos y curvas de calibrado complejas y no lineales.

El detector de aerosol cargado (CAD) es una tecnología revolucionaria que proporciona una respuesta consistente para compuestos no volátiles y la mayoría de compuestos semi-volátiles a niveles sub-nanogramo en columna y a lo largo de un amplio rango dinámico. Este detector no requiere que la molécula contenga un cromóforo o sea capaz de ionizarse (Figura 1). La variación de respuesta entre analitos es mínima e independiente de la estructura química, desde azúcares simples a proteínas. Finalmente, este detector no condiciona los procesos de separación al ser un detector completamente compatible con elución en gradiente.

Funcionamiento del detector

El principio de operación de este detector se ilustra en la Figura 2. Básicamente, el detector convierte el efluente de la columna en un aerosol seco y aplica

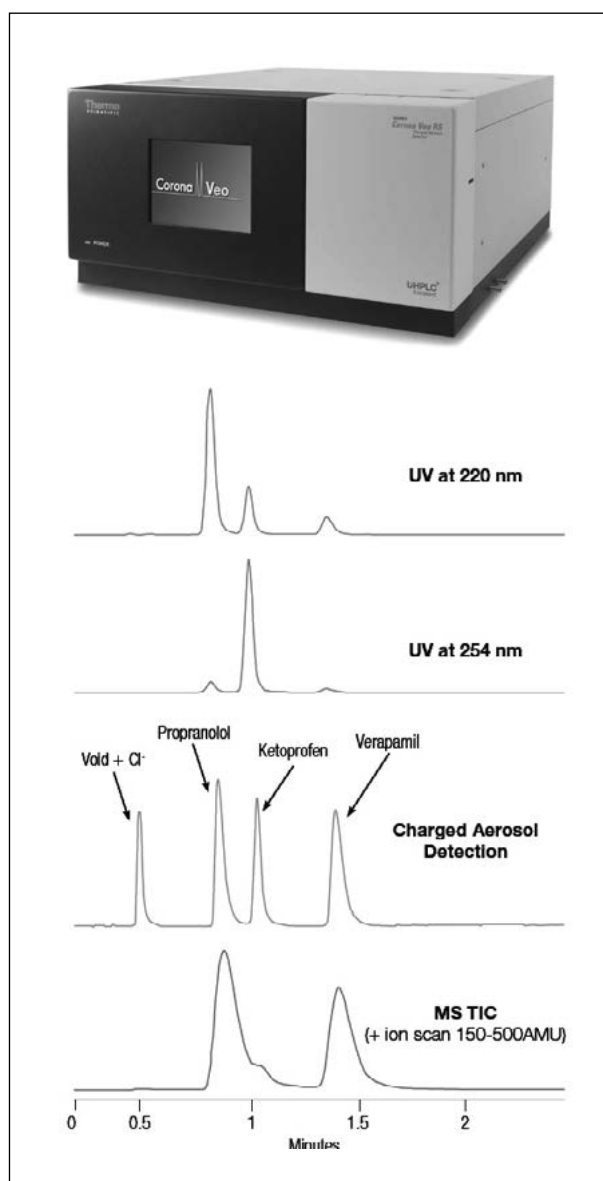


Figura 1. Arriba: detector Thermo Scientific Dionex Corona Veo; Abajo: Comparación de la respuesta de detectores UV, CAD y MS. Obsérvese la ausencia de respuesta para todos los compuestos con detector UV y MS, así como la uniformidad de respuesta para el detector CAD.

una carga eléctrica a las partículas, de manera que la cantidad de carga medida por el electrómetro es proporcional a la masa del compuesto. Los procesos que tienen lugar en el detector son:

- 1) El eluyente de la columna cromatográfica entra en el detector.
- 2) Se produce la nebulización neumática del eluyente.

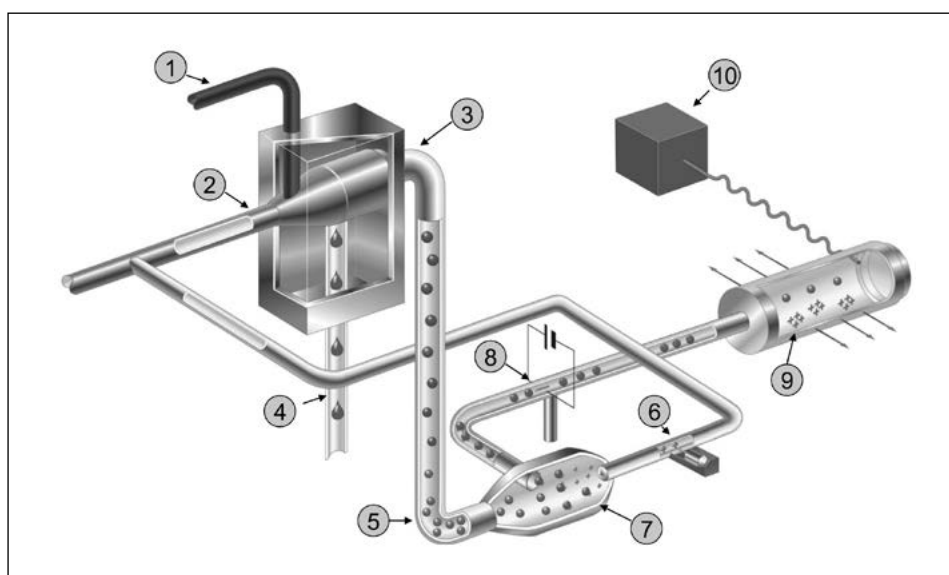


Figura 2. Esquema de funcionamiento del detector de aerosol cargado.

- 3) Las gotas más pequeñas entran en el tubo de secado y forman partículas una vez que el disolvente es evaporado.
- 4) Las gotas más grandes se expulsan por el drenaje.
- 5) Las partículas secas entran en la cámara de mezcla.
- 6) El flujo de gas del detector pasa a través de la aguja de descarga (corona).
- 7) El gas cargado colisiona con las partículas del aerosol, transfiriéndoles carga.
- 8) El gas ionizado sin reaccionar es eliminado.
- 9) Las partículas cargadas remanentes son analizadas.
- 10) La señal originada se transfiere al software cromatográfico.

La respuesta del detector está directamente relacionada con la masa de compuesto que entra en el detector. Un incremento en la cantidad de compuesto que entra en el detector conlleva un incremento en el tamaño de las partículas que se forman en el detector. Las partículas más grandes pueden acomodar más carga, resultando en una mayor respuesta en el detector. Siempre que un compuesto forme una partícula en el proceso de nebulización y desolvatación podrá ser analizado mediante detección de aerosol cargado, independientemente de su estructura química.

Características del detector

El detector Thermo Scientific Dionex Corona Veo mejora las capacidades y extiende las ventajas de la detección de aerosol cargado frente a versiones precedentes. Las principales características del detector son:

- 1) Respuesta independiente de la estructura química. Una elección excelente para la medida relativa cuando no hay patrones disponibles (estudios de impurezas o degradación).
- 2) Excelente sensibilidad, sub-nanogramo en columna, independiente del flujo de fase móvil (detector de masa).
- 3) Amplio rango dinámico, hasta 4 órdenes de magnitud, que permite analizar en el rango pg a μg en columna (por ejemplo, permite la medida simultánea de principios activos farmacéuticos e impurezas a niveles $< 0,05\%$ en un mismo análisis).
- 4) Amplio rango de aplicación que permite analizar cualquier compuesto no volátil y la mayoría de semi-volátiles sin necesidad de cromóforos o ionización.
- 5) Compatible con HPLC, UHPLC y micro LC al permitir flujos de trabajo entre 0,01 y 2,0 mL/min.
- 6) Compatible con operación en gradiente.
- 7) Operación simple e intuitiva, sin requisitos de optimización.

NOTAS TÉCNICAS

- Integración sencilla en cualquier sistema cromatográfico, HPLC, UHPLC o SFC de cualquier fabricante.
- Detección complementaria ortogonal a la proporcionada por los detectores UV y MS.

Amplio rango de aplicación

El detector Thermo Scientific Dionex Corona Veo proporciona resultados previsibles sin necesidad de una

optimización compleja. Este detector puede utilizarse en un amplio rango de aplicaciones tanto en investigación básica como en procesos de control de calidad. En la Figura 3 se muestran algunos ejemplos:

- Lípidos.
- Polímeros.
- Fármacos.
- Azúcares.

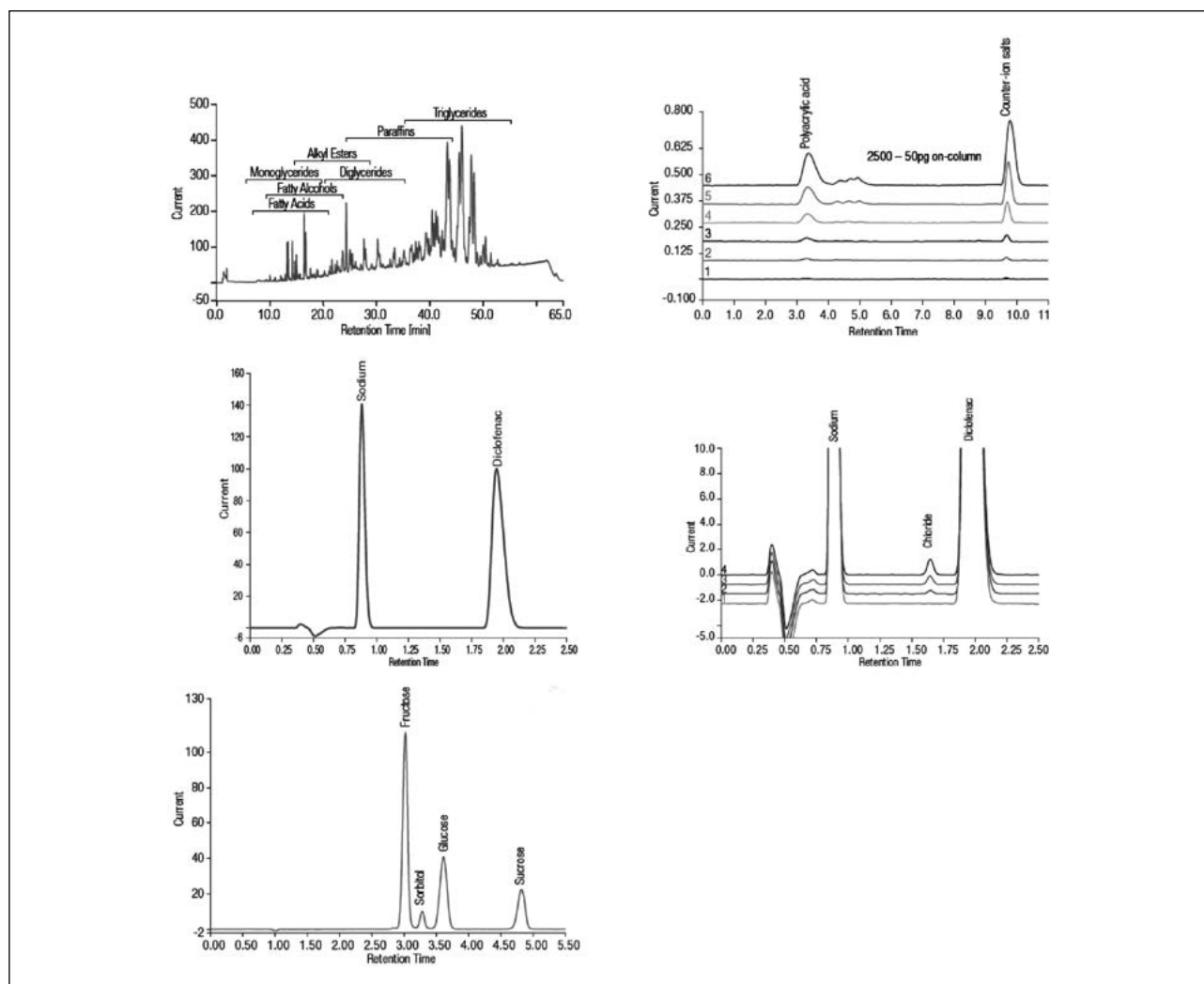


Figura 3. Ejemplos de aplicación del detector de aerosol cargado. Arriba-derecha: análisis de lípidos en aceite de algas. Arriba-izquierda: ácido poliacrílico en agua de refrigeración. Centro: análisis rápido de diclofenaco, contraión e impurezas. Abajo-izquierda: análisis de azúcares en zumo de manzana.

ThermoFisher
SCIENTIFIC

Thermo Fisher Scientific
Avenida de la Vega, 1
Edificio 1 - 4ª Planta. 28108 Alcobendas (Madrid)
Phone: +34 91 484 59 65
www.thermofisher.com

PERFIL AROMÁTICO DEL CHOCOLATE NEGRO

LECO Corporation; Saint Joseph, Michigan USA



Introducción

Comprender los aromas característicos en una muestra compleja de interés, así como los compuestos químicos asociados a esos aromas, puede ser beneficioso para un amplio rango de propósitos en el campo de los alimentos, los saborizantes y las fragancias. Entre otros objetivos, esta información química detallada puede ser de utilidad en el control de calidad, optimización de procesos, ingeniería inversa de características aromáticas deseadas, y para una mejor comprensión del producto o muestra de interés. La cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) es una buena alternativa para proporcionar información química específica a través de la separación, identificación y cuantificación rutinaria de analitos individuales en mezclas complejas. Estos analitos individuales pueden ser relacionados con sus propiedades aromáticas específicas, contribuyendo así a una completa caracterización aromática de la muestra de interés. Además, el acoplamiento de la microextracción en fase sólida en espacio de cabeza (HS-SPME) con GC-MS proporciona un flujo de trabajo completo, abarcando desde la preparación de la muestra hasta el análisis de datos para este tipo de estudios. La HS-SPME es una técnica de muestreo que aísla los analitos volátiles y semivolátiles del espacio de cabeza de la muestra de interés, mientras que la GC separa dichos analitos entre sí y la MS los detecta, permitiendo su identificación y cuantificación.

En esta nota técnica, describimos cómo la información proporcionada por esta técnica analítica y las herramientas de procesamiento automatizadas pueden

llevar a una caracterización aromática completa de una muestra de chocolate negro.

La Tabla 1 recoge los parámetros empleados para el análisis de una muestra de chocolate mediante HS-SPME y GC-MS. Las muestras se incubaron durante 5 minutos a 60 °C y fueron posteriormente extraídas durante 15 minutos a 60 °C con una fibra DVB/CAR/PDMS (Supelco). Inmediatamente después de la extracción, la fibra se expuso en el puerto de inyección del GC durante 3 minutos a una temperatura de 250 °C para la desorción e inyección de los compuestos extraídos. Entre análisis de muestras sucesivas, la fibra se reacondicionó durante 5 minutos a 250 °C. El automuestreador L-PAL3 de LECO realizó el proceso de extracción de forma completamente automatizada. Los mismos métodos se emplearon para el análisis de una mezcla de patrones de alcanos, analizada para la determinación de los correspondientes Índices de Retención (RI).

Resultados y discusión

En la Figura 1 se muestran un cromatograma y un resumen de los descriptores aromáticos representativos de una muestra de chocolate negro. La GC-MS es una herramienta poderosa para este tipo de caracterizaciones porque proporciona, de una forma relativamente sencilla, información detallada sobre la composición química de un producto. El gráfico de la derecha resume las propiedades aromáticas generales para

Tabla 1. Condiciones GC-TOFMS (Pegasus BT).

Cromatógrafo de gases	Agilent 7890 con automuestreador LECO L-PAL 3
Inyección	SPME, 3 min desorción, 250 °C temperatura inyector, split 10:1
Gas portador	He @ 1,4 mL min ⁻¹
Columna	Stabilwax, 30 m × 0,25 mm i.d. × 0,25 µm espesor de fase (Restek)
Programa de temperatura	40 °C (3 min) – 10 °C min ⁻¹ – 250 °C (1 min)
Línea de transferencia	250 °C
Espectrómetro de masas	LECO Pegasus BT
Temperatura fuente de iones	250 °C
Rango de masas	33-600 m/z
Velocidad de adquisición	10 spectra/s

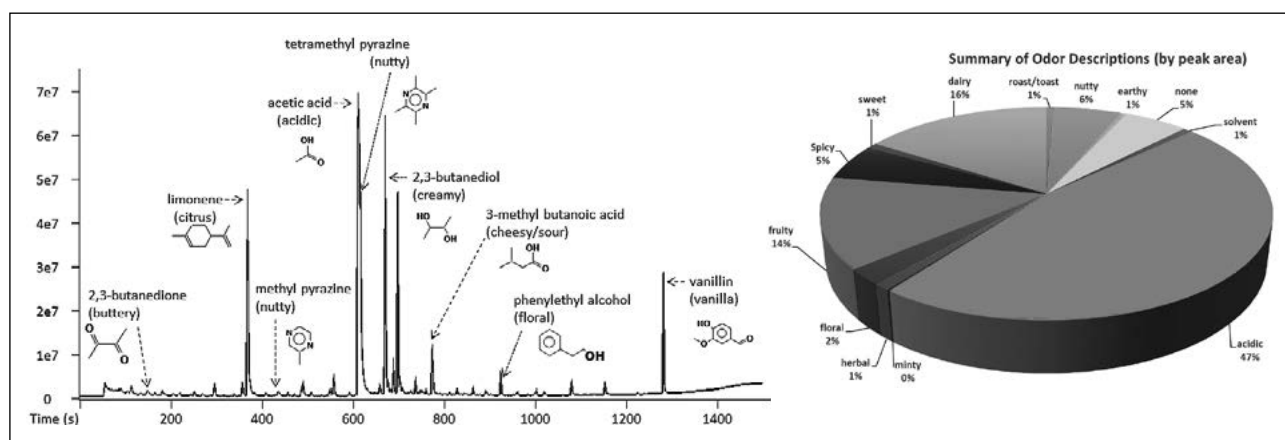


Figura 1. Perfil TIC por GC-MS con analitos representativos y resumen gráfico de la contribución de los diversos descriptores aromáticos asociados a la muestra de chocolate negro en estudio.

esta muestra de chocolate, siendo sus descriptores mayoritarios el ácido, láctico, afrutado, floral, especiado, nuez y tostado. Estos descriptores y su contribución al perfil químico general se han determinado a partir de la información química a nivel individual, mostrándose en el cromatograma de la derecha algunos de los analitos representativos. Esta aproximación analítica permite también considerar dos aproximaciones para mejorar la caracterización del perfil aromático. Así, la separación cromatográfica primaria puede combinarse con una deconvolución matemática de los datos TOFMS a rango de masas completo, consiguiendo de esta forma separar analitos que coeluyen cromatográficamente. Esta deconvolución matemática proporciona datos espectrales limpios para cada analito que son comparados con las bases de datos de las bibliotecas para su identificación tentativa. La determinación de los Índices de Retención añade confianza a estas identificaciones y, una vez identificados, se pueden compilar las propiedades aromáticas asociadas para comprender el perfil aromático general que proporcionan los datos químicos. Los descriptores sensoriales fueron obtenidos de la página web The Good Scents Company¹.

En las Figuras 2 y 3 se muestran diversos ejemplos de la determinación de algunos analitos presentes en el cacao. En la Figura 2, la 1-hidroxi-2-propanona se separa cromatográficamente de otros analitos presentes en esta compleja muestra. Los datos espectrales adquiridos experimentalmente (espectro superior) coinciden con los de la base de datos NIST (espectro inferior) con una similitud de 829 sobre 1000. La información del RI corroboró esta identificación, con un RI observado de 1299 comparado con el de la biblio-

teca, de 1303. Una vez determinada su identidad con suficiente confianza, se procedió a determinar las características aromáticas para este analito. En este caso, el analito contribuye al característico olor a caramelo de la muestra.

Cuando los analitos coeluyen cromatográficamente, la deconvolución permite su separación, proporcionando espectros limpios (Figura 3). Como ejemplo, la 1-(2-furanil)-etanona y la 3,5-dietil-2-metilpirazina son matemáticamente separadas y determinadas basándose en la coincidencia entre los espectros experimentales deconvolucionados y los datos de RI y la información proporcionada por las bases de datos. Los datos experimentales coinciden con la información de la biblioteca con valores de similitud de 888 y 853 para 1-(2-furanil)-etanona y 3,5-dietil-2-metilpirazina, respectivamente. Los RI corroboraron ambas identificaciones con valores calculados de 1506 y 1508 frente a los respectivos valores de la biblioteca (1496 Y 1499). Una vez identificados con confianza, se determinaron las características aromáticas (balsámicas y a nuez) de estos compuestos.

Una vez los analitos de la muestra son aislados, identificados mediante estas herramientas de procesamiento y determinadas las características aromáticas asociadas, el perfil químico-aromático de la muestra puede ser caracterizado en general, como se muestra en la Figura 1. Para relacionar directamente el área de un pico a una detección sensorial, se requerirán el factor de respuesta de ese analito en el instrumento y el umbral sensorial. En ausencia de estos valores, el área de pico puede aún generar un perfil químico para la caracterización aromática. El TIC de-

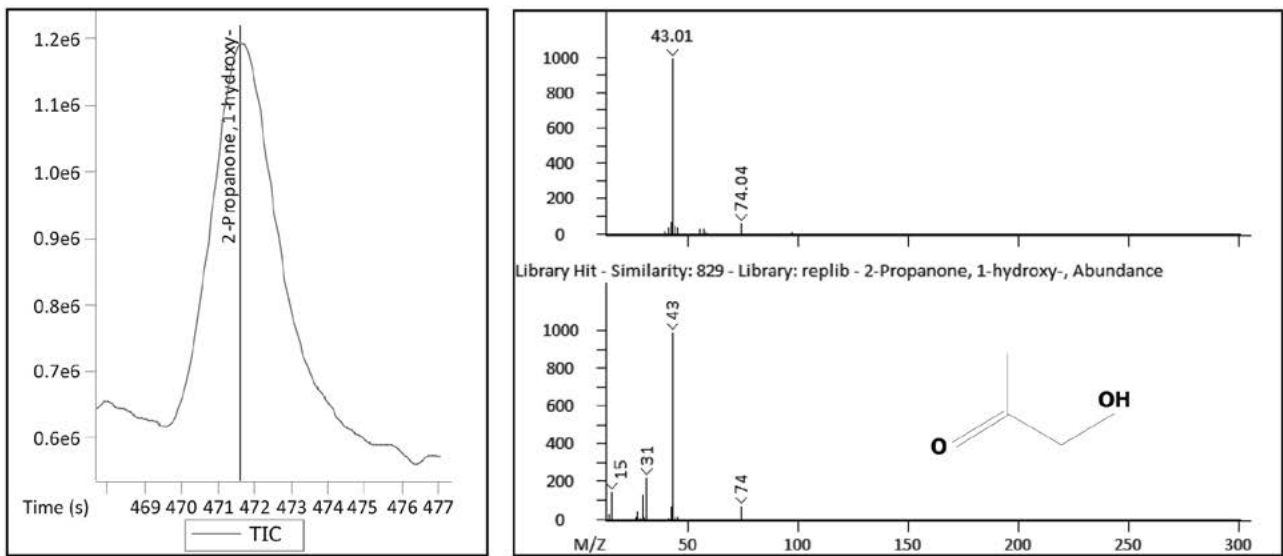


Figura 2. Información para un analito aislado cromatográficamente.

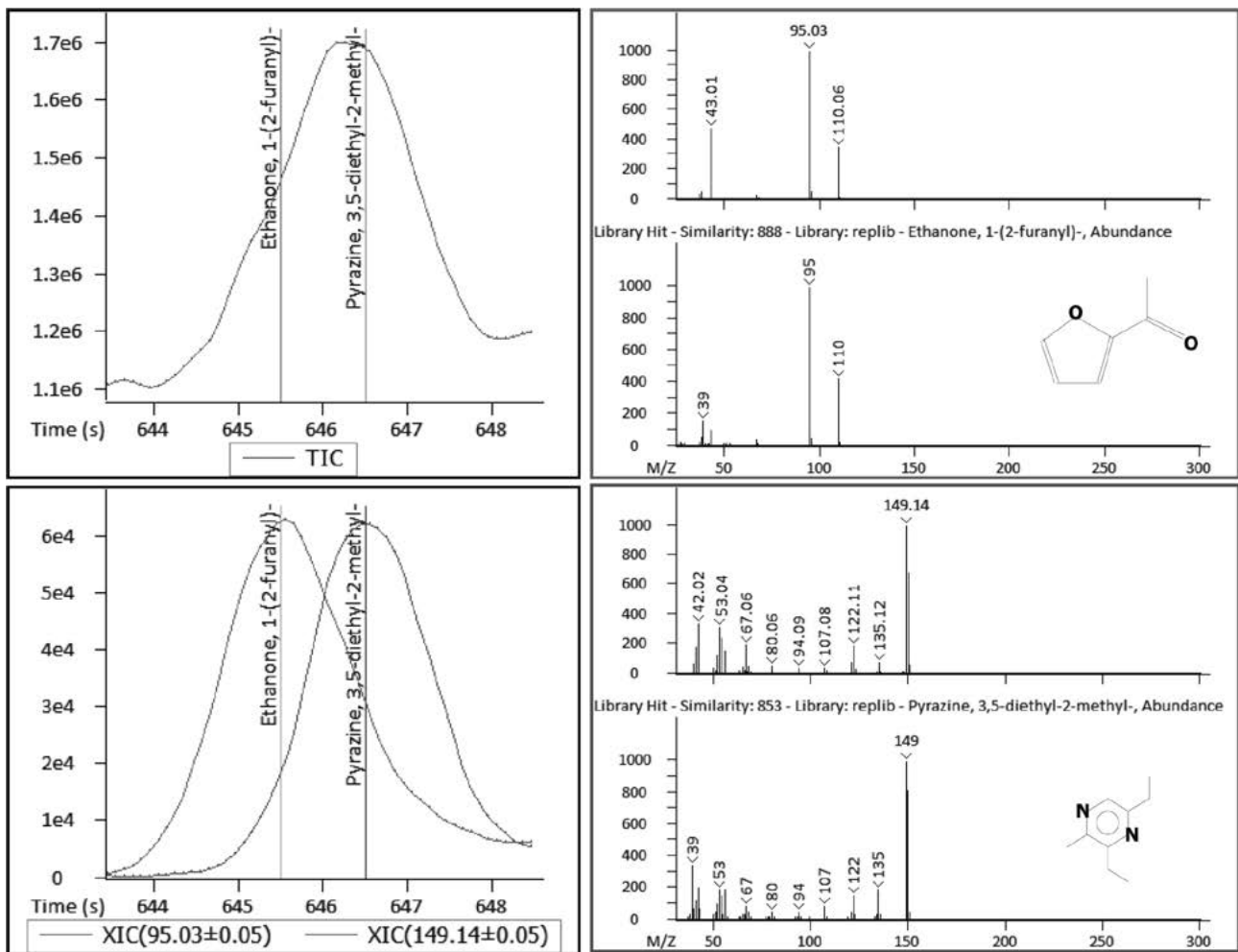


Figura 3. La deconvolución proporciona información sobre analitos que coeluyen cromatográficamente.

NOTAS TÉCNICAS

convolucionado de LECO proporciona una medida razonablemente consistente del área de pico que puede ser útil para esta comparación. El TIC es la suma de todos los picos espectrales en el espectro real deconvolucionado, integrado sobre el perfil de concentración para el pico cromatográfico. Para un pico cromatográfico intenso y aislado, el TIC deconvolucionado es similar al TIC, pero eliminando la línea base y el ruido de fondo. Es preferible usar el TIC deconvolucionado frente al TIC porque, además de resolver coeluciones, permite determinar mejor los analitos presentes a niveles bajos de concentración que, de otra forma, quedarían ocultos por el ruido

de fondo del TIC. El uso del TIC deconvolucionado es también preferible frente al uso de una masa individual por analito debido a la mejor consistencia de los datos. En la Figura 4 se muestran algunos ejemplos del TIC en comparación con el TIC deconvolucionado para la determinación de algunos compuestos del cacao.

El área para cada analito de la muestra fue automáticamente calculada con el TIC deconvolucionado mediante ChromaTOF. El gráfico del perfil químico-aromático completo fue entonces creado agrupando los analitos por olor y tipo y determinándose el

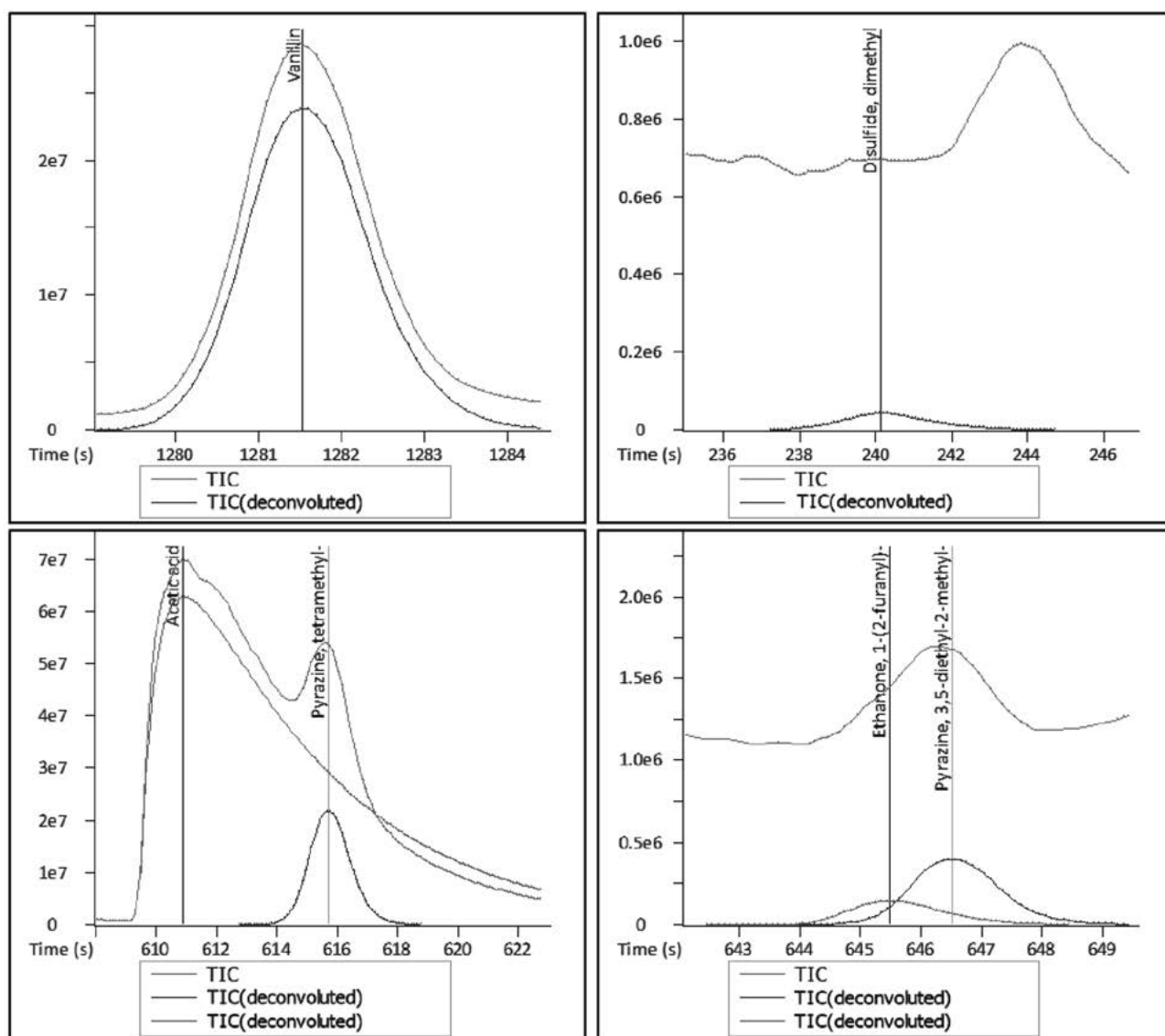


Figura 4. El TIC deconvolucionado proporcionado por el software ChromaTOF elimina el ruido de fondo, la línea base e interferencias de analitos que coeluyen para proporcionar áreas de pico de mayor confianza.

área de pico total para ese olor sumando las áreas de pico de todos los analitos individuales que responden a ese olor. En las tablas de resultados se incluyeron aquellos analitos con una S/N >100 y puntuaciones de similitud >700 confirmados mediante sus IR.

El gráfico de la Figura 1 muestra este resumen. Para un tipo de olor dado se exploraron más descriptores específicos. Por ejemplo, en la Figura 5 se mues-

tra una expansión de los analitos con olores lácteos y, en la Figura 6, una expansión de los analitos con olores afrutados. Por ejemplo, se puede observar la descomposición de varios tipos de aromas afrutados. A través de este tipo de análisis, es posible conectar aromas específicos con productos químicos específicos para obtener una caracterización química más completa y una mejor comprensión de la composición de la muestra.

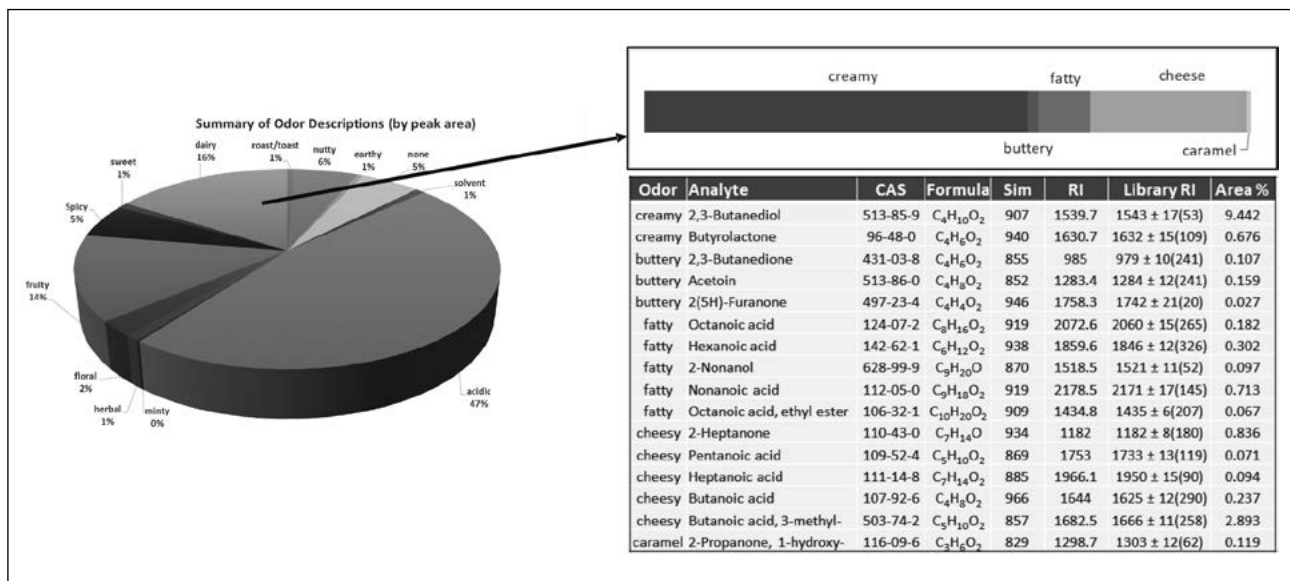


Figura 5. Analitos que comprenden el componente lácteo en la muestra de chocolate negro.

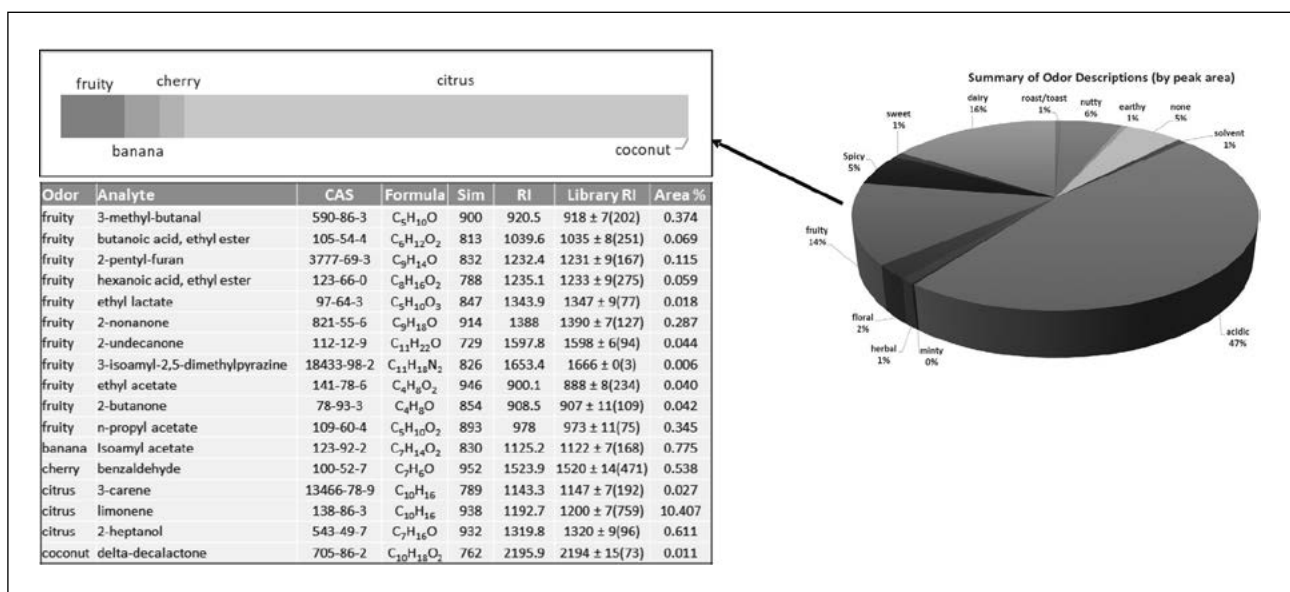


Figura 6. Analitos que comprenden el componente afrutado en la muestra de chocolate negro.

Conclusiones

Este trabajo ha tenido como objetivo el llevar a cabo una caracterización exhaustiva de los componentes volátiles y semivolátiles de una muestra de chocolate negro. El Pegasus BT ha probado ser muy adecuado para esta tarea, al permitir la separación e identificación de los analitos de la muestra de manera eficaz y con la fiabilidad necesaria. Así, ha sido posible determinar de forma inequívoca los aromas característicos y el perfil aromático general a partir de las áreas de pico del TIC deconvolucionado. La GC-MS es, por tanto, una herramienta analítica fundamental para la caracterización de estas muestras.

Referencias

<http://www.thegoodscentscompany.com/>



ANALYSIS OF ELECTRONIC CIGARETTE E-LIQUIDS BY GC-MS

Introduction

Recent estimations indicate that there are over 50 million electronic cigarette users worldwide, mostly as an alternative to cigarettes. The Royal Decree 579/2017 is the current legislation in Spain that regulates the manufacturing, advertising and sale of vaping products^[1]. All vaping products are prohibited for the purchasing online along with the prohibition of e-liquid containers over 10 mL. Unlike in other countries, Spain has stricter packaging laws. Generally, current e-liquids typically only list three ingredients that are present on their

^[1] Ministry of the presidency and regional governments. 2017. Royal Decree 579/2017, of 9 June, regulating certain aspects related to the manufacturing, presentation and marketing of tobacco and related products. [Online]. [7 November 2019]. Available from: http://www.adelta.es/data/Legis/Nacional/Reales%20Decretos/2017%20RD%20579-2017%20fabricacion%20presentacion%20y%20comercializacion%20del%20tabaco_INGLES.pdf.



Website – www.LECO-Europe.com

packaging: propylene glycol (PG), vegetable glycerin (VG) and nicotine. However, it is vital that if an e-liquid is sold in Spain that all ingredients are listed on the packaging. Worldwide other basic regulations for e-cigarettes are currently in place and are generally based on existing conventional tobacco product laws. Regulations are focused on the concentration of nicotine, caffeine and taurine rather than on flavourings and specific impurities as applicable. The list of impurities and critical compounds that should be absent in e-liquids is longer: formaldehyde, acetaldehyde, acrolein, diacetyl, acetyl propionyl, acetoin, diethylene glycol, ethylene glycol, and acetoin.

Scion Instruments developed a method for the quick and easy compositional analysis of e-liquids by gas chromatography with mass spectrometry. Along with vendor listed compounds, various flavour compounds and impurities were identified.

Instrumental

A Scion 436 was coupled with the Scion Single Quad Mass Spectrometer and 8400 Autosampler. Mass Spec WorkStation (MSWS) software was used for instrument control, data acquisition, data processing and spectral library comparisons. Table 1 details the analytical conditions of the GC-MS system. All e-liquid samples were injected neat and with a 1 in 2 dilutions (in methanol).

Table 1. Analytical conditions of the GC-MS.

	Conditions
S/SL	220 °C, Split 1:10, 0.1 µL
Column	Scion-5MS 30 m × 0.25 mm; 1.0 µm
Oven	40 °C (5 min), 10 °C/min to 220 °C (5 min)
Carrier Gas	Helium 1 mL/min constant
Transfer Line	250 °C
Source	230 °C
MS	Full Scan, 45-500 amu, Scan Segment

PG/VG mixtures, as the base components of all e-liquids, are challenging to analyse by GC, as they are very viscous and are easily overloaded on the analytical column. Overloading the column results in poor chromatography, which may potentially mask other sample components near the PG/VG peaks.

To overcome these issues, all samples were diluted in methanol [1:2 (v/v)] and a scan segment method was utilized to minimize the amount of base PG/VG components detected. The scan segment method is acquired in MSWS; as well as a standard full scan acquisition, the scan segment method allows user define scan programs to eliminate the issues associated with propylene glycol and vegetable glycerin. During the time scan segment for PG/VG respectively, the first detected mass of both target compounds was increased in order to reduce the amount of base component being identified.

Pure nicotine was used to prepare a calibration curve for the quantification of nicotine in all e-liquids.

Calibration standards were at 0.5, 1, 3, 5, and 10 mg in methanol.

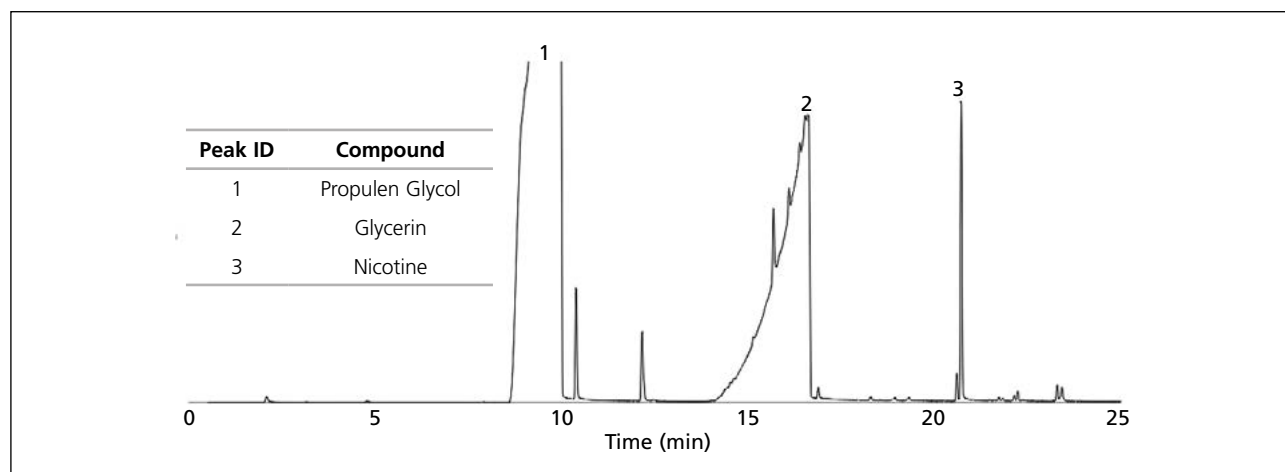
Four commercially available e-liquids labelled as bubble-gum, pear drop, cherry tree, and blueberry were purchased locally. Nicotine contents were listed as 6 mg, except for the blueberry, which was labelled at 3 mg of nicotine. Bubble-gum, pear drop and a cherry tree all had a PG/VG ratio of 70/30 whereas blueberry was made up of 60/40 PG/VG.

Results

All neat and diluted e-liquids were analysed using both the original full scan and optimised scan segment method. Figure 1 details the chromatogram of the neat injection of the bubble-gum e-liquid with no scan segment acquisition whilst Figure 2 details the diluted bubble-gum e-liquid with the scan segment acquisition. Both chromatograms are representative of all e-liquid samples, with and without scan segment acquisition.

Figure 1 shows clear column overloading of the PG and VG peaks whereas Figure 2 shows that with scan segment acquisition and sample dilution the overloading is removed. Additionally, the use of the scan segment acquisition allows the identification of previously masked peaks without the need for extensive sample preparation or method development.

NIST library searches were completed on all samples in order to identify the various impurities and flavour compounds. Common impurities and the

**Figure 1.** Bubble-gum flavoured e-liquid chromatogram; with no scan segment acquisition.

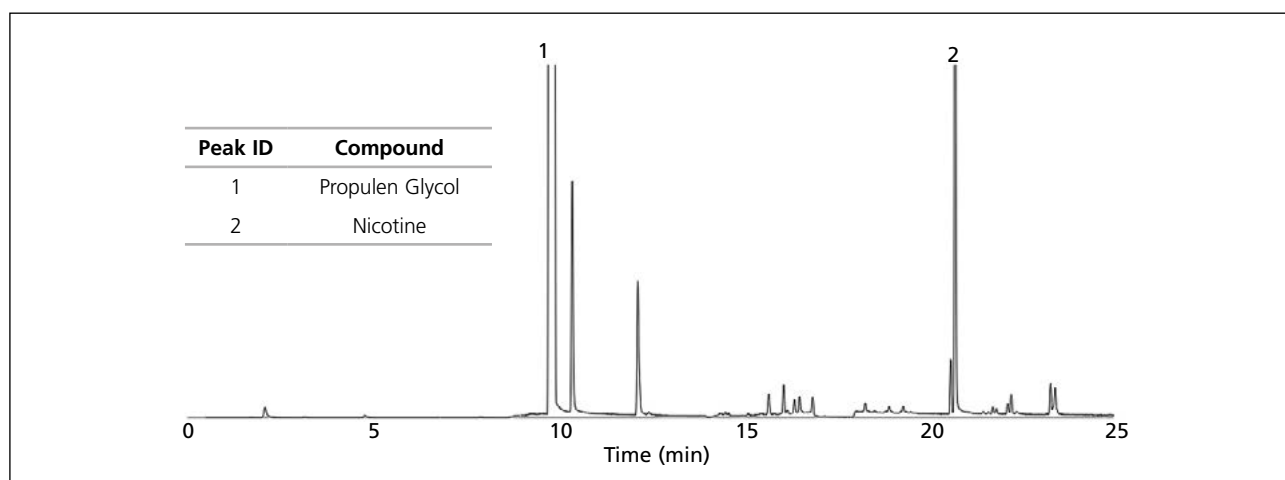


Figure 2. Bubble-gum flavoured e-liquid chromatogram; scan segment acquisition.

unwanted compounds previously listed were targeted during a NIST library search of their mass spectra. None of the listed compounds was found in any of the four e-liquids analyzed.

Table 2 details key compounds and their associated flavours identified in all e-liquids.

Three flavour compounds were identified in all samples; ethyl vanillin, vanillin and γ -decalactone, which are responsible for vanilla and peach flavors,

respectively. All other flavours identified were not shared among all samples, but most could be associated with and expected from the commercial description of the e-liquid flavor profiles.

The nicotine calibration curve can be found in Figure 3. Nicotine has excellent linearity on the Scion 436 GC with SQ MS.

The MSWS software was used to calculate the concentration of each e-liquid. Figure 4 details the

Table 2. Flavour comparison of four e-liquids + represents a positive identification, x represents a negative identification.

Compound	Flavour	Bubble-Gum	Pear Drop	Cherry Tree	Blueberry
Anise Camphor	Liquorice	x	x	+	x
Butyl Acetate	Apple/Banana	x	+	x	x
Butyl Isovalerate	Banana	x	x	x	+
Citral	Lemon	+	x	x	x
Ethyl Butyrate	Pineapple	+	x	+	+
Ethyl Isovalerate	Pineapple	x	x	x	+
Ethyl Vanillin	Vanilla	+	+	+	+
Eugenol	Cinnamon	+	x	x	+
Isoamyl Acetate	Banana	+	+	+	x
Linalool Acetate	Lemon/Mint	+	x	x	+
Maltol	Caramel	+	x	x	+
Menthol	Mint	+	x	x	+
Piperonal	Cherry	x	x	+	x
Vanillin	Vanilla	+	+	+	+
γ -Decalactone	Peach	+	+	+	+
γ -Terpinene	Lemon	x	x	x	+

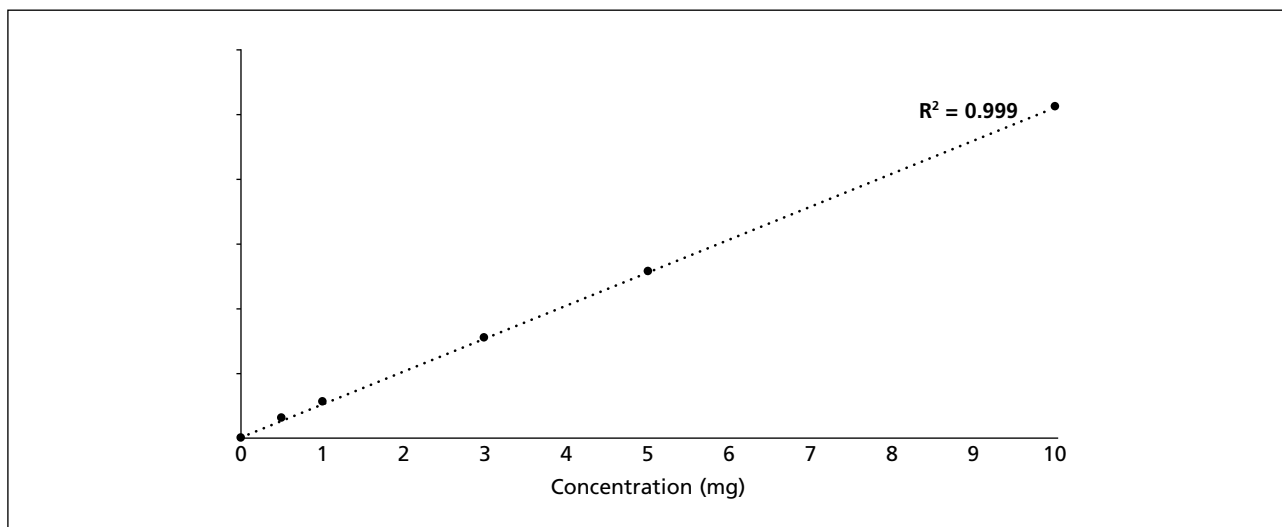


Figure 3. Calibration curve of nicotine.

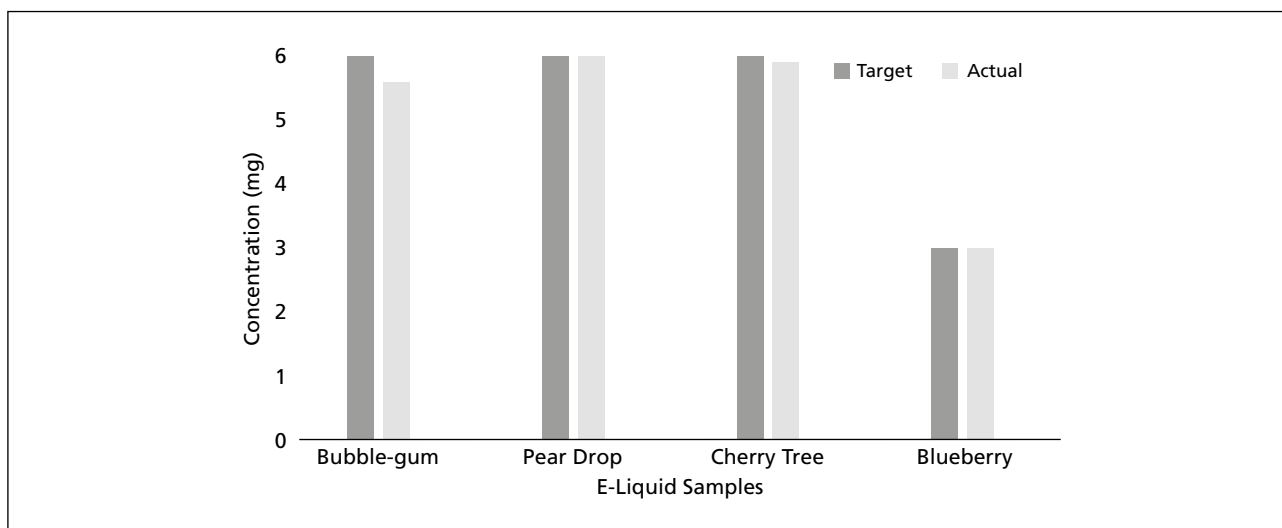


Figure 4. Target, actual and % difference in nicotine concentration of e-liquids.

target and actual concentrations of the e-liquids. Manufacturing regulations do not stipulate how accurate the actual concentration must be, rather than the amount of nicotine in the e-liquids must not be greater than 20 mg. Differences in concentrations were observed in bubble-gum (−7 %), pear drop (+5 %) and cherry tree (−1.7 %).

Conclusion

Scion Instruments developed an analytical method for the composition analysis of e-liquids including fla-

vours and impurities. The Scion 436 GC with Single Quad Mass Spectrometer was used to analyze four commercially available e-liquid samples. A full scan segment method was developed to remove matrix interferences and enable the identification of previously masked peaks. Although no e-liquids exhibited the exact same flavour profile, common flavour compounds were present among samples such as vanilla and peach. NIST library searches confirmed that no unwanted impurities were present in any of the samples. Additionally, variance in nicotine content between listed nicotine concentration and calculated nicotine concentration of all e-liquids was calculated.

NOVEDADES TÉCNICAS



NUEVO METANOL ULTRAGRADIENT: EL MEJOR METANOL PARA SU CROMATOGRAFÍA

El metanol, el alcohol más sencillo que existe, es un líquido incoloro de baja densidad, inflamable y miscible en agua. El metanol y el agua tienen propiedades semejantes debido a que ambos tienen grupos hidroxilo que pueden formar puentes de hidrógeno. Estos dos disolventes forman puentes de hidrógeno entre sí, siendo perfectamente miscibles en todas las proporciones.

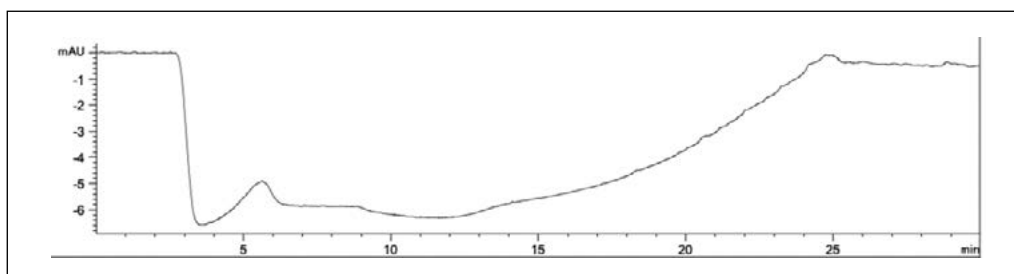
La elevada polaridad del metanol lo convierte en un muy buen solvente de sustancias polares. Estas características lo convierten en uno de los disolventes más utilizados en cromatografía líquida. En esta técnica, la absorbancia de la fase móvil es uno de los puntos críticos en la elección del disolvente: cuanto menor sea la absorción del disolvente, mayor será la precisión del ensayo y mejores serán los resultados en condiciones de elución por gradiente.

Scharlab lanza su nuevo **Metanol Ultragradiant** (ME0339), el único metanol para HPLC del mercado

que asegura la mínima absorción de gradientes a 3 longitudes de onda diferentes (230, 235 y 254 nm).

Este nuevo producto, con las especificaciones más restrictivas del mercado, permite llevar a cabo los análisis más exigentes en todo el rango de longitudes de onda. Tras pasar un exhaustivo Control de Calidad en nuestro laboratorio, podemos asegurar que el **Metanol Ultragradiant** de Scharlab es el disolvente más limpio y con menor número de impurezas, apto para cualquier análisis cromatográfico.

Nuestro Metanol Ultragradiant es apto para UHPLC.



NORMAS DE PUBLICACIÓN

La revista *Cromatografía y Técnicas Afines (CTA)* (ISSN 1132-1369) es el boletín de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) cuya función es la de ser un medio de comunicación entre sus miembros, los profesionales que trabajan en cromatografía y técnicas relacionadas y las empresas del sector.

CTA CONSTA DE LAS SIGUIENTES SECCIONES:

1. Editorial.
2. Artículos científicos.
3. Noticias de la SECyTA (información relacionada con próximas actividades y reuniones de la SECyTA, y con cualquier tema que afecte a los socios de la misma).
4. Informaciones (congresos, reuniones, cursos, nuevas tesis doctorales y otros acontecimientos de interés).
5. Información bibliográfica (reseña de artículos científicos y libros).
6. Novedades y notas técnicas (sección de información de los nuevos productos y/o aplicaciones de las empresas colaboradoras con la SECyTA).
7. Correspondencia (preguntas y respuestas sobre problemas concretos de los lectores de *CTA*).

ARTÍCULOS CIENTÍFICOS

CTA publica artículos relacionados con técnicas analíticas (de separación, de identificación, etc.), bien sobre investigaciones en las propias técnicas o sobre aplicaciones de las mismas. Los autores de los artículos recibirán una compensación económica (**300 euros**) por cada artículo publicado en *CTA*.

Normas generales de publicación

Para publicar artículos en *CTA* **no** es necesario ser socio de la SECyTA.

El idioma de la revista y, por tanto de escritura de los artículos, es el castellano.

Los artículos pueden ser de los siguientes tipos:

- Trabajos originales de investigación.
- Revisiones bibliográficas.
- Artículos de divulgación.
- Series monográficas.

Los trabajos deberán estar escritos a doble espacio, con un tamaño de fuente de 10 ó 12 pt y cada página deberá ir numerada. El tamaño de los trabajos estará comprendido entre 10 y 30 hojas (DIN A4)

incluidas tablas, figuras y bibliografía y deberán enviarse por e-mail a cualquiera de las siguientes direcciones:

mlsanz@iqog.csic.es, ana.ruiz@csic.es,
acsoria@iqog.csic.es, mario@iqog.csic.es

Los trabajos de investigación no deberán haberse publicado previamente. Antes de su publicación todos los trabajos serán revisados por especialistas en el tema, quienes juzgarán la conveniencia de su publicación o propondrán a los autores las modificaciones oportunas.

Título: Deberá ser conciso y reflejar el contenido del trabajo. A continuación se citará el nombre de los autores con la dirección completa de cada uno de ellos, incluyéndose también el correo electrónico y teléfono del autor al que deberá remitirse la correspondencia.

Resumen: De 100 a 150 palabras reflejando de forma clara y concisa el propósito y los resultados más relevantes del artículo.

Texto principal: los trabajos originales de investigación seguirán el formato tradicional, incluyendo **Introducción, Materiales y Métodos, Resultados y Discusión, Conclusiones y Bibliografía.**

Bibliografía: Las referencias bibliográficas aparecerán en el texto entre paréntesis con el apellido de los autores y el año (e.g. Bianco y Edwards, 2008). Si son más de dos autores, se citará el apellido del primero seguido por “y col.,” y el año de publicación (e.g. García-Pérez y col., 2007). Si se citan varias referencias juntas se separarán por punto y coma (e.g. Smith y col., 1980; Brit y col., 1985). Al final del artículo las referencias serán ordenadas por orden alfabético con el siguiente formato:

- 1) Hirota, T., Ohki, K., Kawagishi, R., Kajimoto, Y., Mizuno, S. *Hypertens. Res.* 2007 (30), 489-496.
- 2) Venter, J. C. “The Emission of Sulfur to the Remote Atmosphere” en *The Biogeochemical Cycling of Sulfur and Nitrogen* (Eds. J. N. Galloway y col.). D. Reidel Publishing Co., Dordrech, Holland (1985), p. 346.

Tablas: Se enviarán con un breve encabezamiento y numeradas según el orden de aparición en el texto.

Figuras: Se enviarán en un archivo diferente, separadas y numeradas por orden de aparición en el texto. Las leyendas deberán incluirse al final del artículo a continuación de la bibliografía.

NUEVAS TESIS DOCTORALES

En esta sección se incluyen resúmenes en español de las Tesis Doctorales que se han defendido en los últimos 12 meses. La extensión no debe ser superior a 300 palabras incluyendo título de la tesis, lugar y fecha de defensa y directores de la misma. Sería conveniente incluir una foto del doctor.

El número de resúmenes estará condicionado al espacio disponible para esta sección dentro del Boletín.

INFORMACIÓN BIBLIOGRÁFICA-ARTÍCULOS DE INTERÉS

En esta sección se incluye una revisión de tres artículos recientes y de diferentes autores sobre un tema de interés dentro del ámbito de la cromatografía y técnicas afines. Estas contribuciones serán remuneradas con **75 euros**.

NOTAS TÉCNICAS

Las empresas colaboradoras de la SECyTA pueden contribuir en esta sección con información técnica (nuevos desarrollos, aplicaciones, etc.) en el campo de la cromatografía y técnicas afines. Deberán remitirse a la redacción de *CTA* con anterioridad a los días **1 de mayo** (para el primer número) y **1 de noviembre** (para el segundo).

NOVEDADES TÉCNICAS

Las empresas colaboradoras de la SECyTA disponen en cada número de una página gratuita para informar sobre las novedades de sus productos. La extensión máxima de los originales será 3 DIN A4 mecanografiados a doble espacio, pudiéndose incluir algunos gráficos y fotografías en blanco y negro (no más de tres). Los plazos de envío serán los indicados en las Notas técnicas.

PUBLICIDAD

Cualquier empresa puede publicar anuncios de sus productos, teniendo las empresas colaboradoras de la SECyTA descuentos sobre las tarifas generales.

La adjudicación de los espacios disponibles destinados a publicidad se realizará por riguroso orden de petición.

OTRAS SECCIONES

CTA agradecerá toda la información que reciba de sus lectores sobre asuntos de interés general dentro del campo de la cromatografía y técnicas afines (cursos, conferencias, congresos, ofertas de trabajo, informes sobre el trabajo de grupos españoles y extranjeros, reseñas de libros o cualquier tipo de colaboración).

A su vez, *CTA* publicará, en la medida de lo posible, respuestas de especialistas a todas aquellas cuestiones concretas que formulen los lectores en relación con sus problemas en el laboratorio o con asuntos relacionados en general con la cromatografía y técnicas afines.

Para cualquier cuestión relacionada con *CTA* pueden ponerse en contacto con:

Dra. Ana Cristina Soria Monzón

Instituto de Química Orgánica General, CSIC.
Juan de la Cierva, 3. 28006 Madrid.
Tel.: +34 912 587 559
acsoria@iqog.csic.es

Dra. Ana Isabel Ruiz Matute

Instituto de Química Orgánica General, CSIC.
Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid.
Tel.: +34 912 587 559
ana.ruiz@csic.es

Dra. Mariluz Sanz Murias

Instituto de Química Orgánica General, CSIC.
Juan de la Cierva, 3. 28006 Madrid.
Tel.: +34 912 587 559
mlsanz@iqog.csic.es

Dr. Mario Fernández Martín

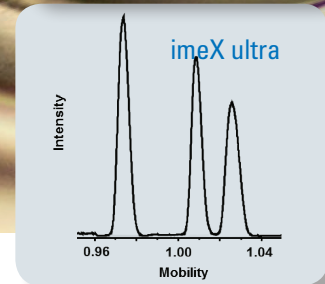
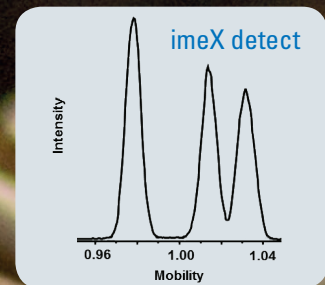
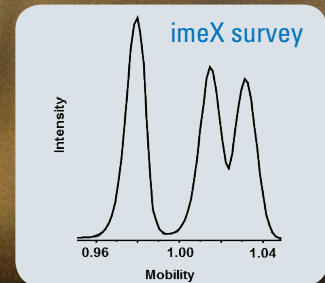
Instituto de Química Orgánica General, CSIC.
Juan de la Cierva, 3. 28006 Madrid.
Tel.: +34 912 587 559
mario@iqog.csic.es



Bruker timsTOF™

Flexibilidad para realizar sus ideas

La tecnología imeX™ exclusiva ofrece alta resolución en movilidad iónica totalmente ajustable. Permite resolver picos solapados, focalizarse en picos de interés, o analizar con precisión CCS.



La movilidad iónica es una técnica de separación eficaz complementaria a la espectrometría de masas que resuelve la estructura tridimensional de un ion. Incrementa la capacidad analítica del sistema, así como la confianza en la caracterización del compuesto.

timsTOF, Bruker presenta la nueva generación de la espectrometría de masas con movilidad iónica.

Bruker ha diseñado el espectrómetro de masas timsTOF como una plataforma abierta, que pueda satisfacer su experiencia y curiosidad.

Para más información, visite www.timstof.com

Innovation with Integrity

TIMS-QTOF MS

Solo para investigación. No para uso diagnóstico.

Presentamos la primera solución para análisis biofarmacéutico con SmartMS

Un sistema LC-MS integrado con software inteligente, fases estacionarias y mantenimiento y soporte, que asegura:

- Datos reproducibles con una configuración simple para cualquier usuario
- Flujos de trabajo optimizados desde la preparación de la muestra hasta el resultado
- Rápida identificación y resolución de problemas sin necesidad de expertos especializados
- Herramientas preparadas para cumplimiento normativo que reducen los riesgos y simplifican la preparación de auditorías
- Resultados de calidad para las aplicaciones de análisis de masa intacta, mapeo de péptidos y análisis de glicanos liberados

www.waters.com/BioAccord

