



“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).