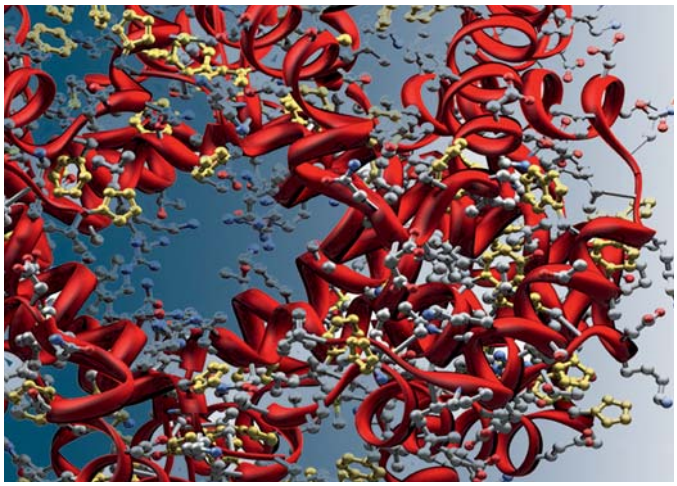
CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

SECYTA

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE
CROMATOGRAFÍA
Y TÉCNICAS AFINES

35

BOLETIN DE LA SECYTA
VOLUMEN 35 NÚM.2 (2014)
WWW.SECYTA.ORG



Sistema LCMS Q-TOF impact II

Todo el detalle en la primera foto

- **Amplio Rango Dinámico** - Cinco órdenes de magnitud para un conocimiento exhaustivo de su muestra
- **Adquisición completa de una sola vez** - Garantiza los mejores resultados cualitativos y cuantitativos en un solo análisis cromatográfico. Mínimo tiempo desde la medida al resultado final.
- **Instant Expertise™**: Integridad Espectral en todo el rango desde moléculas de masa bajas hasta proteinas intactas
- **Fidelidad Isotópica** para la determinación definitiva de la fórmula molecular.

UHR-Q TOF MS

Sólo para investigación. No para uso diagnóstico

CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES
Madrid, Diciembre de 2014 Vol. 35, núm. 2
ISSN 1132-1369

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

ÍNDICE

46 **EDITORIAL**

ARTÍCULO

47 Análisis de carbohidratos bioactivos mediante cromatografía líquida de interacción hidrofílica (HILIC)
M. J. García-Sarrió, S. Rodríguez-Sánchez, A. Martín-Ortiz

NOTICIAS DE LA SECyTA

59 XIV Reunión científica de la SECyTA (43ª Reunión científica del GCTA)
60 X Edición Premios "José Antonio García Domínguez"
63 Homenaje a varios socios
67 14ª Asamblea General de la SECyTA
74 Nuevos socios
75 Jubilaciones: Jesús Sanz Perucha
76 In Memoriam: Prof. George Guiochon
77 Estadísticas de funcionamiento de la Web de la SECyTA

INFORMACIONES

79 Congresos celebrados
82 Calendario de actividades

INFORMACIÓN BIBLIOGRÁFICA

83 Artículos de interés
85 Reseña de libros

DE NUESTRAS EMPRESAS COLABORADORAS

88 Novedades técnicas

Redacción: 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 29 00
Fco. Javier Moreno (javier.moreno@csic.es)
José Ángel Gómez Ruiz (joseangel.gomez.ruiz@csic.es)
Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CSIC-UAM).
Nicolás Cabrera 9, 28049 Madrid. Tel. 91 001 79 00
Publicidad: Mario Fernández (mario@iqog.csic.es)
Instituto de Química Orgánica General (CSIC).
Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid. Tel. 91 562 29 00

Depósito legal: M-1902-1975

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

Diseño de portada: Pau de Riba

Los autores son responsables del contenido de sus artículos.

EDITORIAL

Del 1 al 3 de Octubre se celebraron en Barcelona, en el marco de EXPOQUIMIA, las 14as JORNADAS DE ANÁLISIS INSTRUMENTAL (JAI) (XIV Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines). Como ya sabéis, es la segunda vez que nuestra Sociedad se encarga de su organización en colaboración con la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA) y con el apoyo de la Sociedad de Espectroscopia Aplicada (SEA), la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM) y la Sociedad Española de Proteómica (SEProt). Las jornadas fueron un éxito científico y de organización y desde aquí quiero expresar mi agradecimiento a todos los que participaron en la organización de las JAI 2014, especialmente a los miembros de la SECyTA, cuyo esfuerzo continuado durante varios meses ha hecho que las jornadas se desarrollaran según lo previsto y sin incidencias.

El éxito científico de las jornadas ha venido determinado por varios factores entre los que me gustaría destacar el enorme prestigio de los conferenciantes invitados y el número importante de comunicaciones científicas, tanto orales como posters, lo que ha configurado un programa científico atractivo, competitivo y sugerente, que ha hecho de las JAI, una edición más, un punto de encuentro imprescindible para todos los profesionales implicados en este sector. En esta edición hemos contado con 10 conferenciantes invitados, todos ellos de reconocido prestigio internacional, que nos han presentado los aspectos más novedosos de la química analítica y el análisis instrumental en diferentes campos de aplicación. Algunos de ellos, procedentes de centros de investigación extranjeros, nos han contado las últimas tendencias de las técnicas de separación cromatográficas en dos dimensiones, LCxLC y LCxGC (Dr. Peter Schoenmakers), en bioelectrónica, bionanotecnología y biosensores (Dr. Evgeny Katz), en la miniaturización de técnicas de separación y sus aplicaciones a los alimentos (Dr. Salvatore Fanali), en el desarrollo de la espectrometría de masas (Dr. Marcos N. Eberlin) y en bioafinidad y bioactividad de productos farmacéuticos (Dr. Jeroen Kool). Asimismo, en esta edición contamos con expertos de centros nacionales de investigación que han contado las últimas tendencias en las aplicaciones de la espectrometría de masas en medio ambiente y alimentos (Dra. María Teresa Galcerán), en técnicas quimiométricas aplicadas al estudio de la metabolómica (Dr. Romà Tauler), en el desarrollo de nuevos métodos de análisis para la especiación de elementos traza en alimentos y bioanálisis (Dra. Pilar Bermejo), en nano-biosensores y tecnologías lab-on-a-chip (Dr. Arben Merkoçi) y en miniaturización e integración de sistemas analíticos (Dra. Mª Mar Puyol).

Es una satisfacción comprobar que la participación de los jóvenes investigadores sigue siendo muy elevada, lo que representa una gran implicación de las nuevas generaciones de científicos en el análisis instrumental y en sus diferentes aplicaciones. No cabe duda de que el esfuerzo realizado por SECyTA y el resto de las Sociedades implicadas en conceder una gran cantidad de ayudas para asistir a las JAI y el elevado número de premios concedidos, han contribuido a potenciar su asistencia.

Como ya es tradición, durante la celebración de la cena de gala de las JAI se procedió a la entrega de las medallas a miembros de la SECyTA que, estando ya en la última etapa de su carrera como investigadores, han tenido una relevancia en el desarrollo de las técnicas de separación. Mª Teresa Galcerán, Xavier Guardino, Jesús Sanz, Agustín Olano y Mercedes Ramos han sido las cinco personas a las que la Sociedad ha querido rendir un homenaje. Se trata de un reconocimiento a la labor que éstos desarrollaron durante muchos años y que ha propiciado que los que han venido detrás hayan podido continuar el trabajo en este campo.

A pesar del éxito conseguido en la Reunión, no quiero dejar de mencionar un hecho que a todos nos preocupa y es la disminución en un 30%, respecto a ediciones anteriores, del número de asistentes. No cabe duda de que esta disminución viene fundamentalmente determinada por los tiempos tan difíciles que está atravesando la comunidad científica, que hacen que cada año sea más complicado conseguir financiación para asistir a nuestras reuniones anuales. Sin embargo, creo que podría apuntarse a otras razones adicionales tales como un menor interés por visitar los salones de Expoquimia, ya que, hoy en día, existen otros procedimientos para conocer las últimas novedades de la instrumentación científica (e.g. internet, seminarios on-line), el carácter nacional de este congreso o simplemente que una parte de los asistentes habituales encuentran cada vez más incómodo el formato actual de las JAI, donde el encuentro con otros científicos no es tan sencillo como en nuestros congresos anuales. Todo ello ha hecho que nos hayamos puesto de acuerdo las Sociedades implicadas para abrir un periodo de reflexión con el fin de buscar entre todas un formato más atractivo para nuestros socios y poder seguir celebrando conjuntamente y con la misma periodicidad las JAI.

María José González Carlos
Presidenta de la SECyTA

ARTÍCULOS

Análisis de carbohidratos bioactivos mediante cromatografía líquida de interacción hidrofílica (HILIC)

M.J. García-Sarrió, S. Rodríguez-Sánchez, A. Martín-Ortiz*
Instituto de Química Orgánica General (CSIC). Juan de la Cierva, 3 28006 Madrid
** mjgarciasarrio@iqog.csic.es*

1. INTRODUCCIÓN

Los carbohidratos son la principal fuente de energía de los seres vivos y son, además, uno de los constituyentes más importantes de los alimentos: contribuyen a la mejora de sus propiedades organolépticas, permiten la modificación de texturas, son empleados como marcadores de calidad, etc. Sin embargo, además de estas funciones, dependiendo de su estructura química, algunos carbohidratos poseen efectos beneficiosos para la salud humana, por lo que son susceptibles de ser incluidos como ingredientes en la elaboración de muchos alimentos. Entre estos carbohidratos destacan los iminoazúcares y los oligosacáridos prebióticos, objeto de estudio en este artículo.

A la hora de considerar un carbohidrato o una mezcla de carbohidratos como bioactivos es necesario determinar su composición química y su pureza (FAO, 2007). Por lo tanto, es de gran interés el desarrollo de métodos analíticos adecuados que permitan caracterizar los carbohidratos bioactivos para establecer relaciones estructura-función.

Los carbohidratos bioactivos, tanto los presentes en la naturaleza como los obtenidos mediante procesos de síntesis, generalmente forman parte de mezclas complejas de distintos grado de polimerización (DP), composición monomérica, enlaces glicosídicos, ramificaciones y formas anoméricas. Además de su gran variabilidad estructural, los carbohidratos son compuestos muy polares, de baja estabilidad térmica y gran reactividad química, que no poseen grupos fluorescentes ni cromóforos y no son volátiles (Ikegami y col., 2008; Brokl, 2011). Por tanto, su caracterización supone un reto desde el punto de vista analítico, siendo necesaria la selección de técnicas y optimización de condiciones experimentales que proporcionen una mayor resolución e información estructural. Además, estos carbohidratos bioactivos se encuentran frecuentemente presentes en baja concentración en fuentes naturales, por lo que su determinación requiere el uso de técnicas analíticas sensibles.

La cromatografía de líquidos (LC) es una de las técnicas más usadas para la caracterización de carbohidratos debido a su gran versatilidad y múltiples modos de operación. Entre los modos más empleados se encuentra la cromatografía líquida en fase inversa (RPLC), la cromatografía de alta eficacia de intercambio aniónico (HPAEC) y la cromatografía líquida de interacción hidrofílica (HILIC) (Antonio y col., 2008), destacando en los últimos años el número de aplicaciones de esta última por su elevado poder de resolución para compuestos polares y facilidad de acoplamiento a espectrometría de masas, como se discutirá en la sección 2.

1.1. Iminoazúcares

¿Qué son?

Los iminoazúcares, también llamados azazúcares y polihidroxialcaloides, son carbohidratos bioactivos de bajo peso molecular con estructura similar a la de los monosacáridos, en los que el átomo de oxígeno del anillo se ha reemplazado por un átomo de nitrógeno.

¿Qué tipos hay?

Dependiendo de su estructura química se clasifican en cinco grupos: piperidinas (ej. 1-desoxinojirimicina (DNJ) y α-homonojirimicina (α-HNJ)), pirrolidinas (ej. 2,5-didesoxi-2,5-imino-D-manitol (DMDP)), indolicidinas (ej. swainsonina), pirrolicidinas (ej. australina) y nortropanos (ej. calisteginas). En la **Figura 1** se muestran las estructuras de los iminoazúcares mencionados.

En la naturaleza, los iminoazúcares se encuentran presentes en numerosas familias de plantas (Moraceae, Leguminosae, Hyacinthaceae, Araceae, etc.) (Asano y col., 2005) y en diversos géneros de microorganismos (*Streptomyces*, *Bacillus*, etc.) (Onose y col., 2013). Dentro de las fuentes de origen vegetal cabe destacar la morera (*Morus* sp.) y el trigo sarraceno o alforfón (*Fagopyrum esculentum*) por su mayor disponibilidad e interés alimentario.

¿Qué propiedades tienen?

Los iminoazúcares son conocidos inhibidores competitivos de glicosidasas. Esta actividad se basa en su propiedad de mimetizar la estructura de los azúcares sencillos, lo que permite que puedan ocupar el lugar de éstos

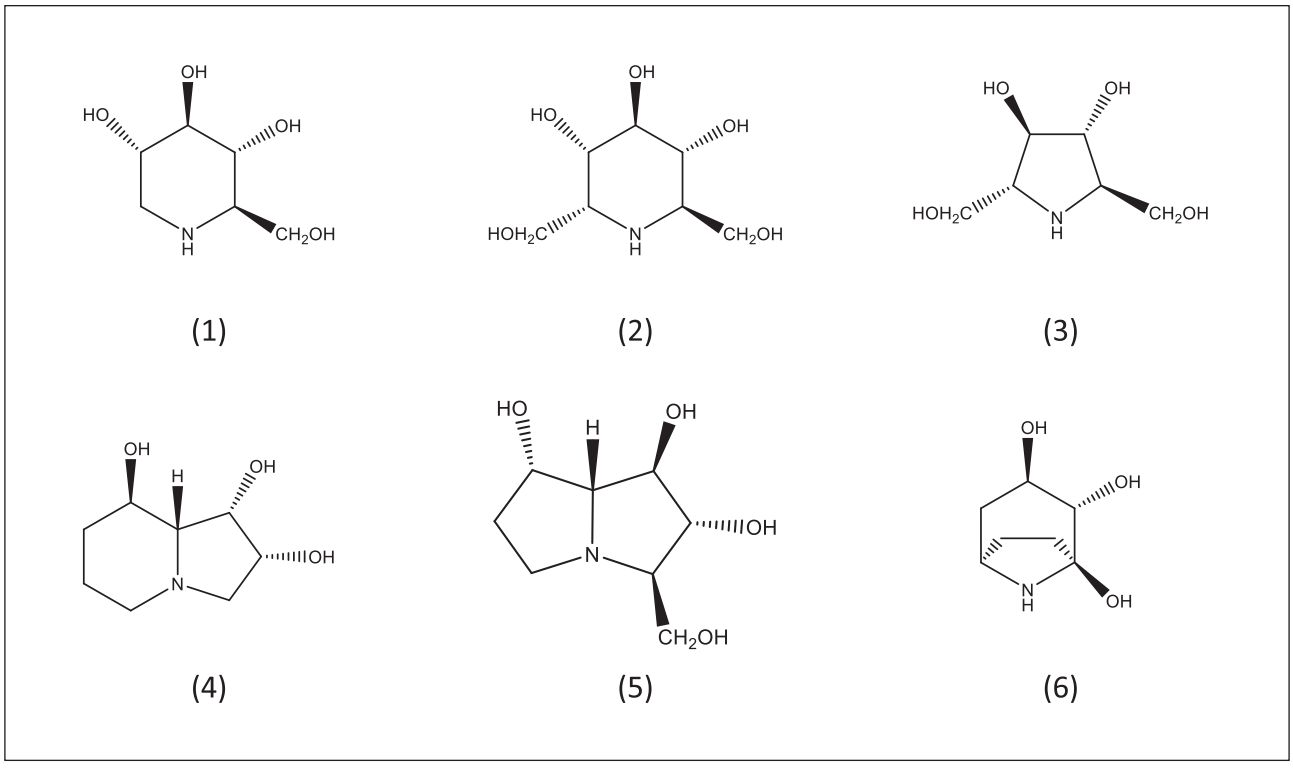


Figura 1. Estructuras químicas de DNJ (1), α-HNJ (2), DMDP (3), swainsonina (4), australina (5) y calistegina A_3 (6).

en reacciones catalizadas por las enzimas que digieren dichos azúcares (Watson, y col., 2001).

Esta actividad inhibitoria les confiere gran utilidad como candidatos para el tratamiento de numerosas enfermedades relacionadas con la absorción de carbohidratos, tales como obesidad y diabetes, de gran incidencia en países desarrolados (Gómez y col., 2012). También los iminoazúcares se han propuesto para el tratamiento de distintos tipos de cáncer, infecciones virales, etc.

Entre los iminoazúcares naturales con mayor actividad antiglicosidasa se encuentran la DNJ, la fagomina (1,5-imino-1,2,5-trideoxi-D-arabino-hexitol), la α-HNJ y el DMDP (Evans y col., 1985).

¿Por qué es difícil su análisis?

La principal dificultad de su análisis es debida al elevado número de isómeros de estos carbohidratos, que generalmente se encuentran en relativamente baja concentración y formando parte de muestras complejas, al igual que la ausencia de patrones comerciales con los que poder compararlos.

1.2. Prebióticos

¿Qué son?

Son ingredientes que producen una estimulación selectiva del crecimiento y/o actividad(es) de uno o de un limitado número de géneros/especies de microorganismos en la microbiota intestinal, confiriendo beneficios para la salud del hospedador (Roberfroid y col., 2010). Para conseguir este crecimiento selectivo y que, en consecuencia, un compuesto sea considerado como prebiótico, debe cumplir los siguientes requisitos (Steed y col., 2009):

i) Resistir los bajos valores de pH gástricos, la acción de enzimas digestivas y de sales biliares.

ii) No ser hidrolizado o absorbido en el tracto gastrointestinal en su totalidad y llegar al intestino grueso, sin variaciones en su estructura molecular.

iii) Ser fermentado selectivamente por bacterias beneficiosas de la microbiota intestinal.

iv) Ser capaz de inducir efectos beneficiosos para la salud.

¿Qué tipos hay?

Los prebióticos son, principalmente, oligosacáridos de diversos DP, aunque también se pueden considerar algunos disacáridos (ej. lactulosa) o polisacáridos. En Europa existen actualmente cuatro productos con reconocidas propiedades prebióticas establecidos en el mercado (Gosling y col., 2010): galactooligosacáridos (GOS), fructooligosacáridos (FOS), inulina y lactulosa. La **Figura 2** muestra algunos ejemplos de estos carbohidratos.

¿Qué propiedades tienen?

Entre las propiedades beneficiosas que pueden ejercer los prebióticos destacan la inhibición del crecimiento de bacterias exógenas y perjudiciales, el favorecimiento de la absorción de minerales, la estimulación del sistema inmune y la producción de vitaminas (Roberfroid y col., 2010)

¿Por qué es difícil su análisis?

El análisis de carbohidratos prebióticos supone un gran reto para la investigación. La similitud estructural de los carbohidratos prebióticos, junto con su frecuente presencia en forma de mezclas complejas de distinto DP y en un amplio intervalo de concentraciones, son algunas de las dificultades que entraña el análisis de estos carbohidratos desde el punto de vista cromatográfico. Por tanto, a veces es necesario llevar a cabo un fraccionamiento de la muestra previo al análisis con el fin de obtener fracciones de un DP determinado y simplificar así su caracterización. El hecho de que prácticamente no existan patrones comercialmente disponibles dificulta aún más su identificación.

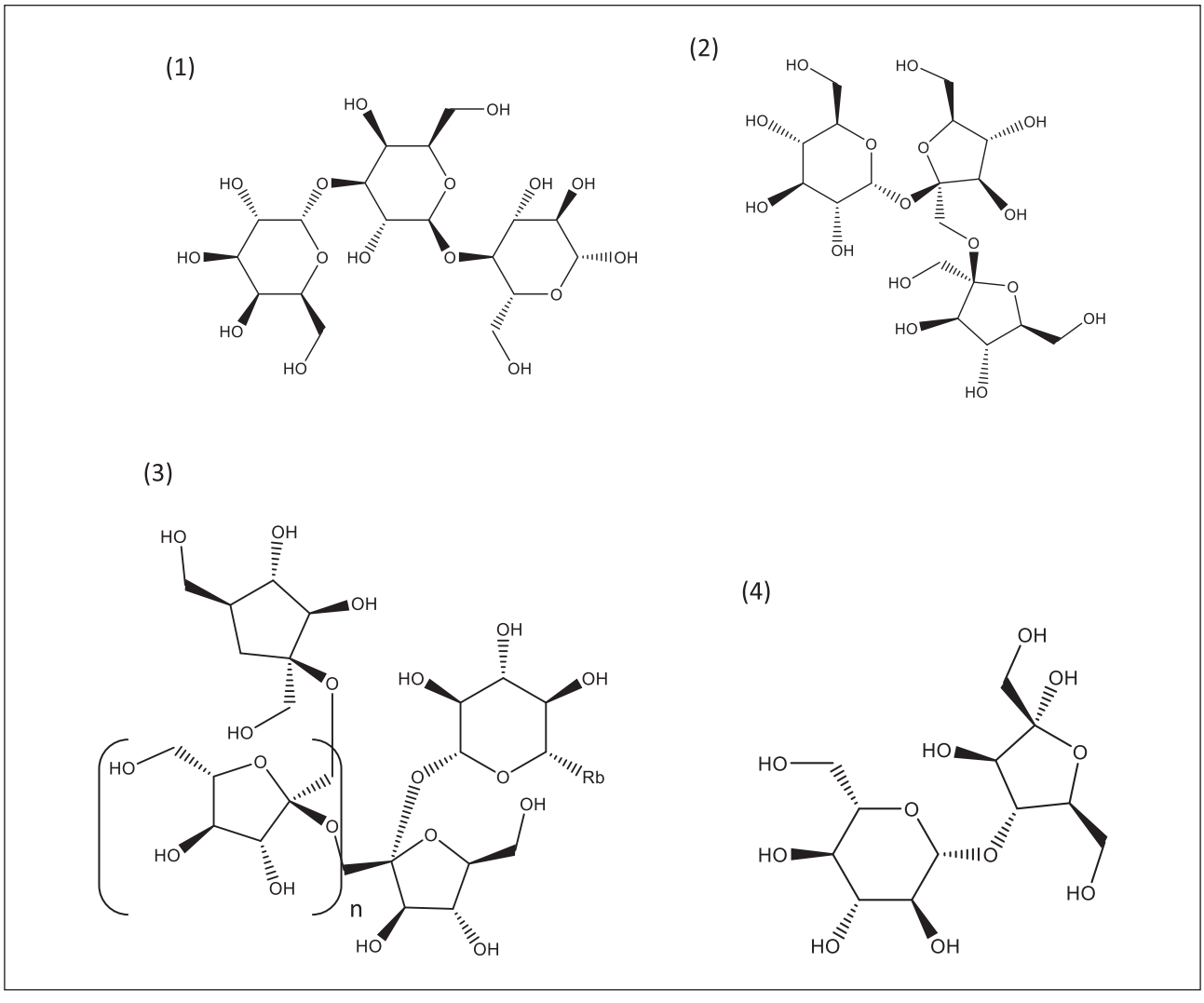


Figura 2. Ejemplo de algunos carbohidratos reconocidos como prebioticos: (1) 3'-galactosil-lactosa (GOS), (2) 1-kestosa (FOS), (3) inulina y (4) lactulosa.

2. CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE INTERACCIÓN HIDROFÍLICA (HILIC)

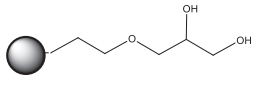
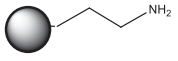
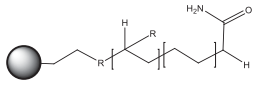
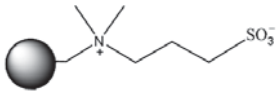
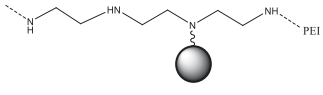
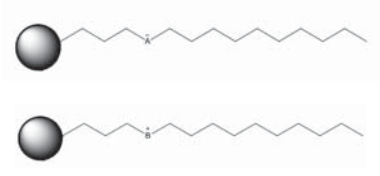
La HILIC es un modo de HPLC, inicialmente desarrollado para la separación de carbohidratos, y que proporciona en la actualidad excelentes resultados en la separación de otras moléculas como aminoácidos, vitaminas, toxinas, etc. HILIC se presenta frecuentemente como una variante de la cromatografía de fase normal (NPLC) puesto que al igual que ésta, utiliza una fase estacionaria polar y la retención de los analitos aumenta con el incremento de su hidrofilia, aunque su mecanismo es mucho más complejo (Greco y Letzel, 2013).

Resulta de gran utilidad para analizar compuestos que, dada su elevada polaridad, se retienen poco en RPLC y eluyen cerca del frente del disolvente, o no dan lugar a una retención efectiva en cromatografía de intercambio iónico. Los analitos polares siempre muestran una buena solubilidad en la fase móvil acuosa utilizada en HILIC, lo que contribuye a solventar los frecuentes problemas relacionados con la baja solubilidad de estos compuestos en las fases de NPLC.

2.1. Fases estacionarias

Aunque cualquier fase estacionaria que pueda retener moléculas de agua, puede ser usada en modo HILIC (Greco y Letzel, 2013), la fase estacionaria típica consiste en la clásica gel de sílice modificada con distintos grupos funcionales polares (amino, diol, amida, etc.; ver **Tabla 1**). Las reconocidas ventajas de la utilización de fases estacionarias hidrofílicas para la separación de compuestos polares, han potenciado en los últimos años el desarrollo de nuevas generaciones de fases estacionarias HILIC, la mayoría de las cuales presentan mecanismos de interacción mixtos basados generalmente en la inclusión de grupos intercambiadores iónicos o grupos zwitteriónicos (Buszewski y Noga, 2011; ver **Tabla 1**). En general, las fases estacionarias HILIC se pueden agrupar en neutras, polares o iónicas.

Tabla 1. Ejemplos de fases estacionarias de sílice con distintos grupos funcionales empleadas en HILIC.

Fases estacionarias	Estructura de la fase estacionaria
diol	
amino	
amida	
zwitteriónicas (tipo sulfobetaina)	
intercambio iónico*	
mixtas RP/intercambio iónico	

*PEI: Polietilenimina

2.2. Fases móviles

La fase móvil en HILIC está constituida por una mezcla hidro-orgánica, cuyo porcentaje en agua aumenta con el tiempo de análisis. Una elevada proporción inicial de disolvente orgánico en la mezcla produce que el agua sea fuertemente adsorbida en la superficie de la fase estacionaria hidrofílica. Cuando la cantidad de agua constituye alrededor de un 5% de la fase móvil, la capa de agua adsorbida es lo suficientemente delgada como para crear un sistema de reparto líquido-líquido con la fase orgánica (Greco y Letzel, 2013).

Como disolvente orgánico generalmente se emplea acetonitrilo, aunque se puede utilizar cualquier disolvente aprótico miscible con agua, como tetrahidrofurano o dioxano. Los alcoholes (como metanol o etanol) se pueden también emplear aunque es necesaria una mayor concentración para obtener el mismo grado de retención relativo de los analitos (Hemström y col., 2006). En general, la fuerza de elución para los distintos disolventes utilizados en HILIC aumenta en el orden siguiente: acetonitrilo < tetrahidrofurano < isopropanol y propanol < etanol < metanol < agua (Greco y Letzel, 2013). Además, suelen emplearse aditivos iónicos como el acetato amónico o formiato amónico para controlar el pH y la fuerza iónica de la fase móvil, lo que contribuye a pequeños cambios en la retención (Buszewsky y Noga, 2011).

Por otra parte, es necesario señalar también que el empleo en HILIC de fases móviles del todo compatibles con la Espectrometría de Masas (MS) ha contribuido a la creciente popularidad del acoplamiento directo de ambas técnicas (HILIC-MS).

2.3. Mecanismo de retención

El mecanismo de retención en HILIC es muy complejo y todavía genera controversia entre la comunidad científica. Se ha demostrado que el patrón de elución en HILIC es similar al de la fase normal, por lo que se podría presuponer que el mecanismo debería tener también alguna similitud (Buszewsky y Noga, 2011).

Una de las teorías actualmente aceptadas sostiene que la retención en HILIC es principalmente causada por un proceso de reparto, si bien no se conoce en profundidad su fundamento teórico. Según dicha teoría, la diferente distribución de las moléculas del analito entre el acetronitrilo de la fase móvil y la capa de agua adsorbida sobre la fase estacionaria hidrofílica darían lugar a la separación (Buszewsky y Noga, 2011) (**Figura 3**). Cuanto más hidrofílico sea el analito, más se desplazará el equilibrio hacia la capa de agua inmovilizada en la fase estacionaria, y más se retendrá el analito. La separación, por tanto, no sólo se basa en las polaridades de los compuestos sino también en su grado de solvatación.

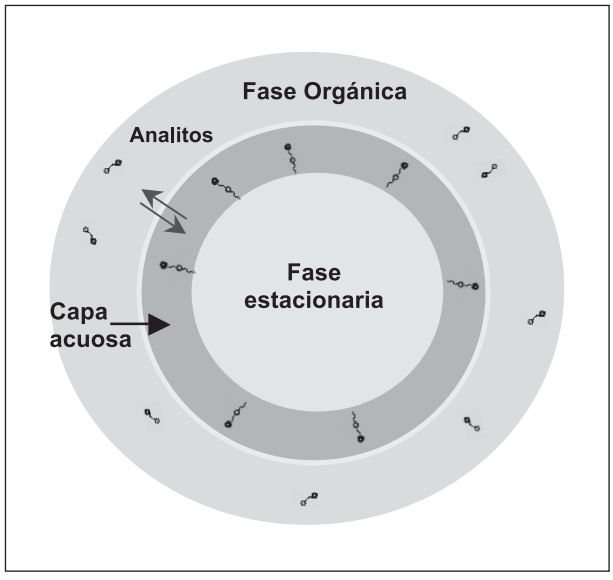


Figura 3. Esquema del mecanismo de retención en HILIC.

Pero el mecanismo en HILIC es más que un simple reparto, e incluye también interacciones tipo puente de hidrógeno entre especies neutras y polares, así como interacciones electrostáticas débiles con la fase estacionaria (Alpert, 1990; Yoshida, 2004). Estas interacciones electrostáticas pueden deberse a cargas residuales de grupos silanoles disociados, que han quedado bloqueados en la fase estacionaria debido a efectos estéricos y no pueden ser eliminados, o a grupos que han sido intencionadamente incorporados a la fase estacionaria (Buszewsky y Noga, 2011). En este último caso, son varios los mecanismos que deben considerarse para explicar la retención, siendo únicamente posible el determinar el mecanismo predominante con la experimentación.

3. ANÁLISIS DE IMINOAZÚCARES

En los últimos años, el desarrollo de nuevos métodos para la separación e identificación de iminoazúcares con potencial uso terapéutico ha cobrado un especial interés (Watson y col., 2001). Como se ha comentado en la Introducción, considerando la variada bioactividad de los distintos iminoazúcares, resulta necesario determinar sus estructuras de forma previa a su uso como ingredientes bioactivos. Existen diversos estudios que analizan imino-

azúcares mediante cromatografía de gases (GC), sin embargo, la necesidad de convertir estos compuestos en derivados más volátiles y estables previo a su análisis, hace que la LC se presente como una alternativa de gran interés. Aunque se han utilizado distintos modos de operación como HPAEC (Yoshihashi y col., 2010), RPLC (Xie, 2008), NPLC (Ritchie y col., 2010), etc, en los últimos años la HILIC ha surgido como una herramienta eficaz para el análisis de estos carbohidratos bioactivos.

La mayoría de los estudios más recientes se han basado en la determinación de DNJ, un iminoazúcar que como ya se ha comentado, ha sido investigado por su potencial uso contra la diabetes, al ser un inhibidor eficaz de la actividad α-glucosidasa. Kimura y col. publicaron en 2004 un estudio en el que se determinaba este iminoazúcar de forma simple y rápida en hojas de morera, utilizando una columna de sílice funcionalizada con grupos amida (de dimensiones 250 mm longitud × 4,6 mm d.i.) y una mezcla de acetonitrilo:agua (81:19, v/v) conteniendo 6,5 mM de acetato amónico a un pH de 5,5 como fase móvil. La elución se llevó a cabo en modo isocrático a una temperatura de 40 ºC. El flujo de la fase móvil (1 mL min^{-1}) era dividido después de la columna: un flujo de 0,95 mL min^{-1} era enviado a un detector de dispersión de luz (ELSD) y uno de 0,05 mL min^{-1} era enviado a un detector de espectrometría de masas con analizador de tiempo de vuelo (TOF MS), empleándose este último detector para confirmar la identidad del DNJ. Previo a la selección de la columna HILIC, se probaron columnas clásicas de LC de fase normal e inversa en diferentes condiciones, pero no se obtuvieron retenciones adecuadas para dicho iminoazúcar.

En 2007, Nuengchamnong y col. utilizaron la misma columna que Kimura y col. (2004) para la cuantificación mediante cromatografía liquida acoplada a espectrometría de masas tándem (LC-MS/MS) de DNJ en hojas de morera. Sin embargo, estos autores emplearon un medio ácido usando como fase móvil 0,1% de ácido fórmico (eluyente A) y acetonitrilo (eluyente B) y utilizando un programa inicialmente isocrático seguido de una rampa que, curiosamente y a diferencia de Kimura, empezó en proporciones 80:20 (v/v, A:B) hasta 10:90 (v/v, A:B). El flujo utilizado fue de 0,6 mL min^{-1}. El método propuesto supuso una reducción considerable del tiempo de análisis (el tiempo de retención del DNJ varió de 24,5 a 8,1 min), proporcionando además una alta sensibilidad y selectividad en la determinación de este iminoazúcar. Además, los resultados mostraron que existían diferencias en los niveles de DNJ con la etapa de crecimiento de las hojas, observándose mayores niveles de DNJ en hojas jóvenes.

En 2010, Nakagawa y col. propusieron un método por HILIC-MS/MS para la determinación de DNJ, galactosil-DNJ (GAL-DNJ) y fagomina en hojas de morera y productos de sericicultura. En este caso también se utilizó la misma fase amida que en los casos anteriores y una fase móvil con una mayor concentración de ácido fórmico que la utilizada por Nuengchamnong tres años antes (0,1% de ácido fórmico, en ambas fases). El gradiente empleado fue también significativamente diferente, empezando con una relación de acetonitrilo/agua 80:20 (v/v), para alcanzar en 2 minutos una proporción 40:60 (v/v), que se mantenía durante 2,5 min antes de restablecer las condiciones iniciales para el equilibrado de la columna. El empleo de un detector de masas requirió un flujo bajo (0,2 mL min^{-1}) y la temperatura se mantuvo en 40 ºC. En estas condiciones, se consiguió la resolución de DNJ, GAL-DNJ y fagomina en un tiempo análisis inferior a 6 minutos (**Figura 4**).

El método desarrollado, además de selectivo, fue lo suficientemente sensible para el análisis de iminoazúcares en las muestras de interés. Así, los resultados obtenidos probaron que, en contraste con las hojas de morera, los gusanos de seda presentaban una concentración alta de DNJ, moderada de fagomina y baja de GAL-DNJ, lo que sugirió que cuando los gusanos se alimentaban de las hojas de morera, el DNJ y la fagomina eran absorbidos sin sufrir modificaciones, pero el GAL-DNJ era metabolizado en forma de DNJ. Este último iminoazúcar no sólo presenta un efecto inhibidor de la α-glucosidasa, sino que también resulta ser inhibidor del crecimiento de insectos y muestra propiedades insecticidas, de ahí su acumulación en los gusanos como sistema de defensa. En este trabajo además se observaron diferentes concentraciones de iminoazúcares en las hojas de las distintas variedades de morera consideradas.

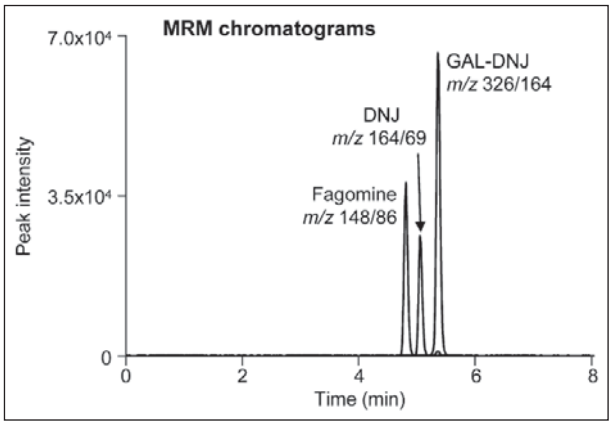


Figura 4. Separación de Fagomina, GAL-DNJ y DNJ mediante HILIC-MS/MS. Reproducida con permiso de Elsevier (Nakagawa y col., 2010).

En 2009, Guitton y col. desarrollaron un método mediante HILIC-MS para el análisis cuantitativo de miglustat en plasma y fluido cerebroespinal humano. Miglustat es el nombre comercial con el que se introdujo en el mercado la *N*-butil-desoxinojirimicina, un iminoazúcar inhibidor de la glucosiltransferasa que cataliza el primer paso de la síntesis de glicoesfingolípidos (GSLs). Varias mutaciones genéticas producen una acumulación patógena de los GSLs en los lisosomas, que conducen a los desórdenes encontrados en varias enfermedades como las de Tay-Sachs, Gaucher or Niemann-Pick (Platt y col., 1998).

En este caso, la separación de analitos se llevó a cabo con una columna HILIC de sílice (150 × 2,1 mm, 3 μm), manteniendo la temperatura a 25 °C. El eluyente utilizado en la separación en modo isocrático fue una mezcla de acetonitrilo/agua/acetato amónico 100 mM (pH 5) en proporciones 75/10/15 (v/v/v), con un flujo de 0,23 mL min^{-1}. Las condiciones seleccionadas dieron lugar a la elución del miglustat como un pico estrecho y simétrico sin interferencias de las correspondientes matrices biológicas (plasma o fluido cerebroespinal). Este método proporcionó ventajas en cuanto a selectividad y tiempos de retención (t_R miglustat = 3,7 min) en comparación con los métodos previos descritos en la bibliografía y basados en otros modos de LC (Mellor y col., 2000). Además, la buena exactitud y precisión obtenidas por este método permitieron su validación para el seguimiento en la administración de miglustat en pacientes con enfermedades relacionadas con los GSLs.

Recientemente, Rodríguez-Sánchez y col. (2014) evaluaron el uso de diferentes fases estacionarias hidrofílicas para el análisis simultáneo de patrones de iminoazúcares (DNJ, α-HNJ, 1-desoximannojirimicina (DMJ), miglitol ((2R,3R,4R,5S)-1-(2-hydroxyethyl)-2-(hydroxymethyl) piperidine-3,4,5-triol), *N*-metil-DNJ y DMDP) y otros carbohidratos de bajo peso molecular (LMWC) (fructosa, glucosa, *myo*-inositol, sacarosa y galactinol). Las columnas evaluadas fueron las siguientes: i) una fase estacionaria de polihidroxietil-aspartamida (100 x 2,1 mm); ii) una fase zwitteriónica tipo sulfoalquilbetaina (150 x 2,1 mm); y iii) una fase tipo amida (150 x 4,6 mm). Para cada una de las columnas se probaron diferentes flujos y gradientes de una fase móvil binaria consistente en acetonitrilo:agua con diferentes modificadores orgánicos (0,1% de ácido acético y 0,1% de hidróxido amónico). El análisis estadístico de los resultados, considerando como variables la resolución, el tiempo de retención y la simetría de los picos, mostró como fase estacionaria óptima la columna tipo amida, empleando 0,1% hidróxido amónico como aditivo de la fase móvil, a diferencia de los trabajos previamente descritos donde se utilizaba ácido fórmico o diversas sales. Las condiciones óptimas se aplicaron al análisis de iminoazúcares y otros LMWC en extractos de hojas de morera, de semillas de trigo y de bulbos de jacinto.

Para complementar estos resultados, y empleando la columna previamente seleccionada, los mismos autores evaluaron el efecto de distintos modificadores orgánicos de la fase móvil (metanol y acetonitrilo), aditivos (ácido fórmico, ácido acético, acetato amónico e hidróxido amónico) y temperaturas de la columna (25, 45, 55 y 65 °C) para el análisis de iminoazúcares y otros compuestos de bajo peso molecular en extractos de *Aglaonema* sp. Las condiciones óptimas resultaron ser acetonitrilo:agua con 0,1% hidróxido amónico como fase móvil y 55 °C. El acoplamiento de HILIC a la espectrometría de masas (QTOF MS) en este trabajo permitió la caracterización de diversos iminoazúcares, algunos de ellos detectados por primera vez, en extractos procedentes de distintas especies de aglaonema (García-Sarrió y col., 2014).

4. ANÁLISIS DE PREBIÓTICOS

Debido a las limitaciones de la GC para el análisis de oligosacáridos de alto DP, la LC suele ser la técnica de elección para el análisis de carbohidratos prebióticos. Algunos trabajos, como el de Brokl y col. (2011), evalúan distintos modos de operación de LC para el análisis de estos compuestos: RPLC, HPAEC, cromatografía de carbón grafitizado (GCC) y HILIC. Los mejores resultados se obtuvieron empleando GCC y HILIC. Mientras que la GCC permitió una separación adecuada para oligosacáridos del mismo DP y distinto enlace glicosídico, la HILIC proporcionó los mejores resultados para el análisis de mezclas de oligosacáridos con distintos DPs. En general, en HILIC los oligosacáridos eluyen en función de su DP y su retención es inversamente proporcional al aumento de agua en la fase móvil (Alpert, 1990).

En la **Tabla 2** se muestran algunos ejemplos de aplicaciones recientes de la HILIC para el análisis de diferentes tipos de carbohidratos prebióticos.

Tabla 2. Ejemplos del análisis de distintos tipos de carbohidratos prebióticos mediante HILIC.

PREBIÓTICO	COLUMNA	CONDICIONES	REFERENCIA
GOS	Amida (150 x 4,6 mm; 3,5 µm)	0,4 mL min^{-1}; 35 ºC ACN/H_2O + 0,1% NH_4OH (80:20, v/v) → (50:50, v/v) en 31 min	Hernández-Hernández y col., 2011
	Polimérica (300 x 20 mm; 9 µm) Semipreparativa	10 mL min^{-1}; 21 ºC DP2: ACN/H_2O (80:20, v/v) DP3: ACN/H_2O (76,5:23,5 v/v)	Coulier y col., 2009
	Zwitteriónica tipo sulfobetaína (150 x 2,1 mm; 5 µm)	0,1 mL min^{-1} MeOH+ 5% NH_4OAc/H_2O (95:5, v/v) → (50:50, v/v) en 40 min	Sinclair y col., 2010
	Maltosa "click" semipreparativa (100 x 10 mm)	3 mL min^{-1}; 30 ºC ACN/H_2O (70:30, v/v) 10 min → (40:60, v/v) 10 min	Fu y col., 2010
FOS	Maltosa "click" analítica (150 x 4,6 mm)	1 mL min^{-1}; 30 ºC H_2O/ACN (30:70, v/v) → (50:50, v/v) en 60 min	Fu y col., 2010
INULINA	β-ciclodextrina (250 x 4,6 mm; 5 µm)	0,4 mL min^{-1}; 26 ºC ACN/H_2O (70:30, v/v)	Wang y col., 2010
LACTULOSA	ZIC®-HILIC (250 × 2,1 mm; 5 µm)	0,3 mL min^{-1} ACN/NH_4OAc 5 mM (75:25, v/v) → (40:60, v/v) en 10 min	Kubica y col., 2012

La mayor parte de los estudios se han centrado en el desarrollo de métodos de análisis de GOS, mezclas complejas de oligosacáridos basados en unidades de galactosil-galactosa y galactosil-glucosa, producidos mediante transgalactosilación de la lactosa, usando como catalizador β-galactosidasas de diferentes orígenes biológicos.

Sinclair y col. (2009) consiguieron una buena separación de estos oligosacáridos empleando una columna zwitteriónica tipo sulfobetaína (150 × 2,1 mm d.i., 5 µm), una fase móvil constituida por metanol con 5 mM de acetato amónico (fase A) y agua (fase B) y un gradiente que varió de 95:5 (v/v, A:B) hasta 50:50 (v/v, A:B) en 40 min.

Recientemente, Hernández-Hernández y col. (2011) evaluaron el empleo de tres fases estacionarias de sílice funcionalizadas con diferentes grupos (zwitteriónica de tipo sulfobetaína, polihidroxietilaspartamida y amida) con el fin de obtener tiempos de retención cortos, picos con buenas simetrías y resoluciones mayores de 1 en el análisis de GOS. Para la optimización del método se emplearon mezclas de patrones comerciales con distintos DP y enlaces glicosídicos. En las tres columnas se observaron diferencias en la forma de los picos, en su retención y en su selectividad debidas a la distinta naturaleza de las fases estacionarias. Las mejores condiciones se obtuvieron empleando la columna tipo amida y usando como fase móvil acetonitrilo:agua con 0,1% de hidróxido amónico. La **Figura 5** muestra los perfiles obtenidos para una mezcla de GOS comercial (DP2-DP5) analizada empleando estas condiciones. Aunque las separaciones obtenidas fueron adecuadas, la resolución completa de todos los oligosacáridos presentes en esta mezcla compleja no fue posible. Gracias al empleo de un detector de masas con analizador de trampa de iones (IT), que permitió la obtención de espectros de masas en tándem (MS^n), se consiguió identificar tentativamente los enlaces glicosídicos de estos oligosacáridos, empleando las reglas de fragmentación deducidas del análisis previo de distintos patrones. Los resultados de este trabajo muestran la utilidad de HILIC-MS^n para separar y caracterizar mezclas complejas de GOS sin un paso previo de fraccionamiento, enriquecimiento o derivatización.

La HILIC no sólo se ha empleado de forma analítica sino también semipreparativa, permitiendo una separación eficaz de carbohidratos de distinto DP. Así, en 2009, Coulier y col. emplearon una fase estacionaria polimérica y distintos porcentajes de acetonitrilo:agua en modo isocrático para conseguir el aislamiento de GOS de DP2 y DP3, que fueron posteriormente analizados mediante HPAEC-PAD.

En 2010, Fu y col. desarrollaron un método para el análisis de distintos oligosacáridos, entre ellos GOS y FOS. Los FOS son oligosacáridos obtenidos por hidrólisis enzimática de la inulina o sintetizados con β-fructofuranosidasas usando como sustrato la sacarosa. Para la separación de estos compuestos se empleó una columna de sílice con grupos maltosa ("click" maltosa) fabricada en el laboratorio y mezclas acetonitrilo:agua como fase móvil. Para mostrar el potencial de separación del método HILIC desarrollado, se aplicó éste al análisis de mezclas complejas de FOS de alto peso molecular, consiguiéndose la correcta resolución de oligosacáridos con DP entre 10 y 50, y resolviéndose más de 40 picos en 60 minutos. Este mismo método se adaptó a condiciones semipreparativas y, como resultado, se obtuvieron distintos oligosacáridos con alta pureza en un rango de DP de 2-7. A modo de ejemplo, se muestra el perfil cromatográfico obtenido para la purificación de GOS (**Figura 6**). Este método de HILIC muestra ventajas como la buena reproducibilidad y estabilidad del procedimiento preparativo.

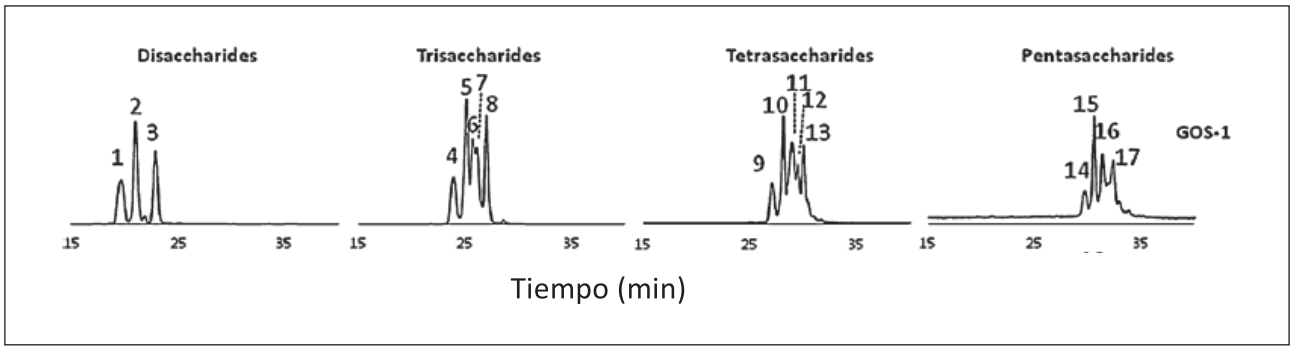


Figura 5. Perfiles de los GOS comerciales analizados por HILIC-MS^n. Reproducida con permiso de Elsevier (Hernández-Hernández y col., 2011).

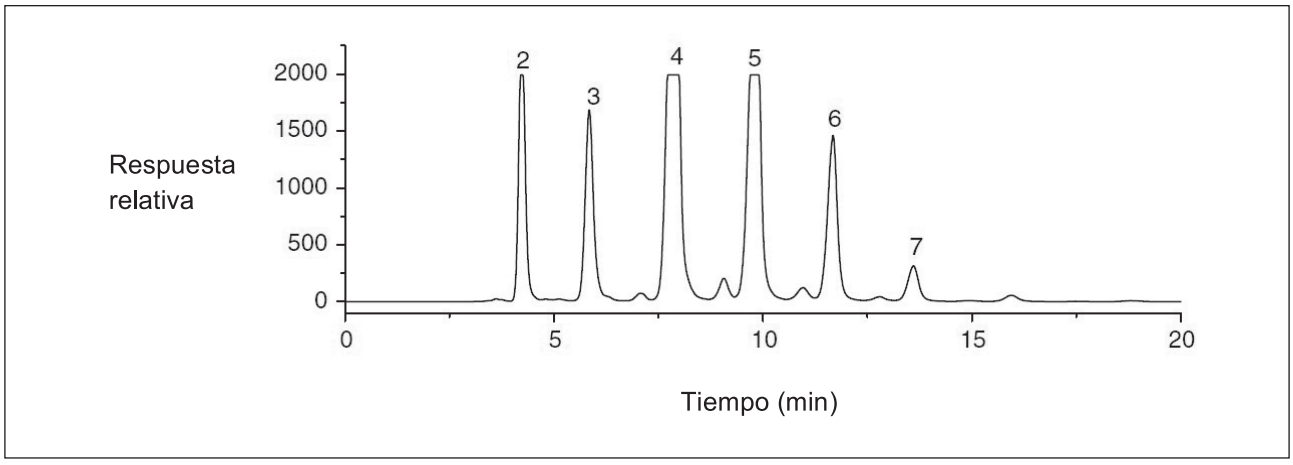


Figura 6. Cromatograma obtenido por HILIC semipreparativa para la purificación de GOS. Los números de los picos corresponden al DP de los oligosacáridos. Reproducida con permiso de Elsevier (Fu y col., 2010).

Otro de los prebióticos es la inulina, polisacárido formado por monómeros de fructosa unidos por enlaces β-(1→2) con una unidad inicial de glucosa, enlazados de forma lineal, ramificada o cíclica. Es menos estudiado que los GOS y los FOS debido a su alto peso molecular, pero aun así existen algunos trabajos (Wang y col., 2010). Los cicloinulinoligosacáridos (ciclofructanos, CF) son oligómeros de fructofuranosa ciclados producidos por la fermentación de la inulina por el *Bacillus circulans*. Wang y col. (2010) desarrollaron un método basado en el empleo de una columna β-ciclodextrina y una fase móvil hidro-orgánica con altos porcentajes de acetonitrilo para el análisis de CF y sus isómeros las ciclodextrinas. Al igual que en casos anteriores los tiempos de retención y separación decrecen a medida que aumenta el agua en la fase móvil, siendo la retención mayor cuanto mayor es el DP **(Figura 7)**. Estos autores llevaron también a cabo estudios en condiciones isocráticas con distintos porcentajes de agua en la fase móvil para evaluar el mecanismo de retención de estos compuestos.

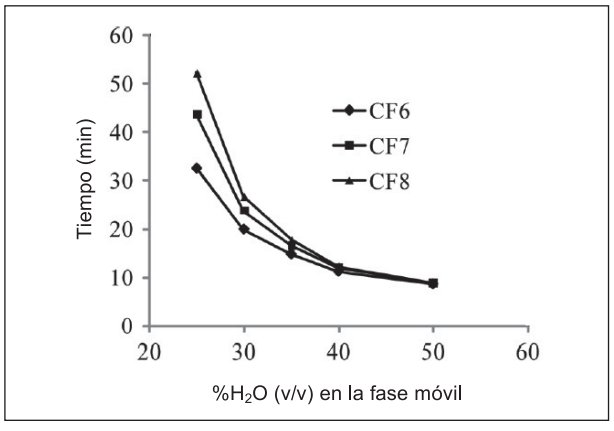


Figura 7. Tiempo de retención de CFs de distinto DP vs. porcentaje de agua en la fase móvil. Reproducida con permiso de Elsevier (Wang y col., 2010).

En cuanto a la lactulosa, Gal-β-(1→4)-Fru, disacárido sintético obtenido a través de la isomerización de la lactosa, Kubica y col. (2012) emplearon un método basado en el empleo de una columna zwitteriónica tipo sulfobetaína, y una fase móvil acuosa con acetato de amonio (5 mM), para la determinación de este disacárido y otros carbohidratos (manitol y sacarosa) en muestras de orina, con objeto de estudiar la permeabilidad de la pared intestinal. El uso de un detector de MS/MS permitió distinguir moléculas con el mismo peso molecular como lactulosa y sacarosa. A pesar de la complejidad de la matriz, el método propuesto resultó ser rápido, sencillo, sensible y reproducible.

5. CONCLUSIONES

HILIC ha demostrado ser un modo de HPLC adecuado para el análisis de carbohidratos bioactivos, tanto de alto como de bajo peso molecular, gracias a su alto poder de resolución y eficacia. Además, la posibilidad de acoplamiento directo a espectrometría de masas, principalmente en equipos con analizadores de masas tándem, aporta importante información estructural sobre los compuestos separados. Sin embargo, todavía existe un campo por explorar en la separación de carbohidratos del mismo peso molecular y diferentes enlaces glicosídicos o formas anoméricas. Es de prever, por tanto, que el desarrollo de

columnas HILIC esté orientado en un futuro próximo en este sentido. Por otra parte, una mejora del conocimiento del mecanismo de retención ayudaría al desarrollo de dichas fases estacionarias. Por último, aunque el acoplamiento de HILIC a espectrómetros de masas con analizadores tipo QTOF o triple cuadrupolo (QqQ) ofrecen gran información estructural para los carbohidratos de bajo peso molecular (DP<3), son realmente los analizadores tipo IT los que podrían ayudar a ampliar el conocimiento sobre las estructuras de oligosacáridos de mayor DP.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad (proyecto CTQ2012-32957) y la Junta de Andalucía (proyecto AGR-7626). SRS agradece al Ministerio de Economía y Competitividad su beca predoctoral.

BIBLIOGRAFÍA

- Alpert, A. J., 1990. Hydrophilic-Interaction Chromatography for the Separation of peptides nucleic-acids and other polar compounds. J Chromatogr A, 499, 177-196.
- Antonio, C; Larson, T; Gilday, A; Graham, I; Bergstrom, E; Thomas-Oates, J., 2008. Hydrophilic interaction chromatography/electrospray mass spectrometry analysis of carbohydrate-related metabolites from Arabidopsis thaliana leaf tissue. Rapid Commun Mass Sp, 22, 1399-1407.
- Asano, N., Yamauchi, T., Kagamifuchi, K., Shimizu, N., Takahashi, S., Takatsuka, H., Ikeda, K., Kizu, H., Chuakul, W., Kettawan, A., Okamoto, T., 2005. Iminosugar-producing Thai medicinal plants. J Nat Prod, 68, 1238-1242.
- Brokl, M., Hernández-Hernández, O., Soria, A.C., Sanz, M.L., 2011. Evaluation of different operation modes of high performance liquid chromatography for the analysis of complex mixtures of neutral oligosaccharides. J Chromatogr A., 1218, 7697-7703.
- Buszewski, B., Noga, S., 2012. Hydrophilic interaction liquid chromatography (HILIC) – a powerful separation technique. Anal Bioanal Chem, 402, 231-247.
- Coulier, L., Timmermans, J., Bas, R., Van Del Dool, R., Haaksman, I., Klarenbeek, B., Slahhek, T., Van Dogen, W., 2009. In-Depth Characterization of Prebiotic Galacto-oligosaccharides by a Combination of Analytical Techniques. J Agric Food Chem, 57, 8488-8495.
- Dill, K.A., 1987. The mechanism of solute retention in reversed-phase liquid-chromatography. J Phys Chem, 91, 1980-1988.
- Evans, S. V., Fellows, L. E., Shing, T. K. M., Fleet, G. W. J., 1985. Glycosidase inhibition by plant alkaloids which are structural analogs of monosaccharides. Phytochemistry, 24, 1953-1955.
- FAO Technical Meeting on prebiotics. Food and Agriculture Organization of the United Nations (FAO). Food Quality and Standards Service (AGNS). September 15-16, 2007.
- Fu, Q., Liang, T., Zhang, X., Du, Y., Guo, Z., Liang, X., 2010. Carbohydrate separation by hydrophilic interaction liquid chromatography on a 'click' maltose column. Carbohyd Res, 345, 2690-2697.
- García-Sarrió, M. J., Rodríguez-Sánchez, S., Quintanilla-López, J. E., Soria, A. C., Sanz, M. L., 2014. Analysis of iminosugars and other low molecular weight carbohydrates in *Aglaonema Commutatum Treubii* extracts by HILIC-QTOF MS. Jornadas de Análisis Instrumental, Barcelona, 2014.
- Gómez, L., Molinar-Toribio, E., Calvo-Torras, M. Á., Adelantado, C., Juan, M. E., Planas, J. M., Cañas, X., Lozano, C., Pumarola, S., Clapés, P., Torres, J. L., 2012. d-Fagomine lowers postprandial blood glucose and modulates bacterial adhesion. Brit J Nutr, 107, 1739-1746.
- Gosling, A., Stevens, G.W., Barber, A.R., Kentish, S. E., Gras, S.L., 2010. Recent advances refining galactooligosaccharide production from lactose. Food Chem, 121, 307-318.
- Greco, G., Letzel T., 2013. Main Interactions and Influences of the Chromatographic Parameters in HILIC Separations. J Chromatogr Sci, 51, 1-10.
- Guitton, J., Coste, S., Guffon-Fouilhoux, N., Cohen, S., Manchond, M., Guillaumont, M., 2009. Rapid quantification of miglustat in human plasma and cerebrospinal fluid by liquid chromatography coupled with tandem mass spectrometry. J Chromatogr B, 877, 149-154.
- Hemström, P., Irgum, K., 2006. Hydrophilic Interaction Chromatography. J Sep Sci, 29, 1784-1821.
- Hernández-Hernández, O., Calvillo, I., Lebrón-Aguilar, R., Moreno, F.J., Sanz, M.L., 2011. Hydrophilic interaction liquid chromatography coupled to mass spectrometry for the characterization of prebiotic galactooligosaccharides. J Chromatogr A., 1220, 57-67.
- Ikegami, T., Horie, K., Saad, N., Hosoya, K., Fiehn, O., Tanaka, N., 2008. Highly efficient analysis of underivatized carbohydrates using monolithic-silica-based capillary hydrophilic interaction (HILIC) HPLC. Anal Bioanal Chem, 391, 2533-2542.
- Jandera, P., 2011. Stationary and mobile phases in hydrophilic interaction chromatography: a review. Anal Chim Acta, 692, 1-25.
- Kato, A., Kato, N., Miyauchi, S., Minoshima, Y., Adachi, I., Ikeda, K., Asano, N., Watson, A. A., Nash, R. J., 2008. Iminosugars from Baphia nitida Lodd. Phytochemistry, 69, 1261-1265.

- Kimura, T., Nakagawa, K., Saito, Y., Yamagishi, K., Shinmoto, H., Miyazawa, T., 2004. Simple and rapid determination of 1-deoxynojirimycin in mulberry leaves. Conferencia: 3rd International Conference on Food Factors (ICoFF-3) Tokyo, JAPAN, 2003. Biofactors. 22, 341-345.
- Kimura, T., Nakagawa, K., Saito, Y., Yamagishi, K., Suzuki, M., Yamaki, K., Shinmoto, H., Miyazawa, T., 2004. Determination of 1-deoxynojirimycin in mulberry leaves using hydrophilic interaction chromatography with evaporative light scattering detection. J Agr Food Chem, 52, 1415-1418.
- Kim, J.W., Kim, S.U., Lee, H.S., Kim, I., Ahn, M.Y., Ryu, K.S., 2003. Determination of 1-deoxynojirimycin in *Morus alba* L. leaves by derivatization with 9-fluorenylmethyl chloroformate followed by reversed-phase high-performance liquid chromatography. J Chromatogr A.,1002, 93-99.
- Knox, J.H., Pryde, A., 1975. Performance and Selected applications of a new range of chemically bonded packing materials in High-Performance Liquid-Chromatography. J Chromatogr A, 112, 171-188.
- Kubica, P., Kot-Wasik, A., Wasik, A., Namie'snik, J., Landowski, P., 2012. Modern approach for determination of lactulose, mannitol and sucrose in human urine using HPLC–MS/MS for the studies of intestinal and upper digestive tract permeability. J Chromatogr B, 907, 34-40.
- Nakagawa, K., Kubota, H., Kimura, T., Yamashita, S., Tsuzuki, T., Oikawa, S., Miyazawa, T., 2007. Occurrence of orally administered mulberry 1-deoxynojirimycin in rat plasma. J Agr Food Chem, 55, 8928-8933.
- Nakagawa, K., Ogawa, K., Higuchi, O., Kimura, T., Miyazawa, T., Hori, H., 2010. Determination of iminosugars in mulberry leaves and silkworms using hydrophilic interaction chromatography-tandem mass spectrometry. Anal Biochem, 404, 217-222.
- Nuengchamnong, N., Ingkaninan, K., Kaewruang, W., Wongareonwanakij, S., Hongthongdaeng, B., 2007. Quantitative determination of 1-deoxynojirimicycin in mulberry leaves using liquid chromatography-tandem mass spectrometry. J Pharmaceut Biomed, 44, 853-858.
- Onose, S., Ikeda, R., Nakagawa, K., Kimura, T., Yamagishi, K., Higuchi, O., Miyazawa, T., 2013. Production of the α-glycosidase inhibitor 1-deoxynojirimycin from Bacillus species. Food Chem, 138, 516-523.
- Platt, F.M., Neises, G.R., Reinkensmeier, G., Townsend, M.J., Perry, V.H., Proia, R.L., Winchester, B., Dwek, R.A., Butters, T.D., 1997. Prevention of lysosomal storage in Tay-Sachs mice treated with N-butyldeoxynojirimycin. Science, 276, 428-431.
- Riedo, F., Kováts, E.S., 1982. Adsorption from Liquid-mixtures and Liquid Chromatography. J Chromatogr A 239, 1-28.
- Ritchie, G., Harvey, D. J.; Feldmann, F., Stroeher, U., Feldmann, H., Royle, L., Dwek, R.A., Rudd P.M., 2010. Identification of N-linked carbohydrates from severe acute respiratory syndrome (SARS) spike glycoprotein. Virology, 399, 257-269.
- Roberfroid, M., Gibson, G.R., Hoyles, L., McCartney, A.L., Rastall, R., Rowland, I., Wolvers, D., Watzl, B., Szajewska, H., Stahl, B., Guarner, F., Respondek, F., Whelan, K., Coxam, V., Davicco, M.J., Leotoing, L., Wittrant, Y., Delzenne, N.M., Cani, P.D., Neyrinck, A.M., Meheust, A., 2010. Prebiotic effects: metabolic and health benefits. Brit J Nutr, 104, S1-S63.
- Rodríguez-Sánchez, S., Quintanilla-López, J.E., Soria, A.C, Sanz, M.L., 2014. Evaluation of different hydrophilic stationary phases for the simultaneous analysis of iminosugars and other low molecular weight carbohydrates in vegetable extracts by liquid chromatography tandem mass spectrometry. J Chromatogr A, 1372, 81-90.
- Sinclair, H.R., de Slegte, J., Gibson, G.R., Rastall, R.A., 2009. Galactooligosaccharides (GOS) Inhibit Vibrio cholerae Toxin Binding to Its GM1 Receptor. J Agric Food Chem, 57, 3113-3119.
- Steed, H., Macfarlane, S., 2009. Mechanisms of Prebiotic Impact on Health, en Prebiotics and Probiotics Sciences and Technology, Editores D. Charalampopoulos y R. Rastall. Springer: New York. PP 135-162.
- Tolstikov, V. V., Fiehn, O., 2002. Analysis of Highly Polar Compounds of Plant Origin: Combination of Hydrophilic Interaction Chromatography and Electrospray Ion Trap Mass Spectrometry. Anal Biochem, 301, 298-307.
- Wang, C,. Breitbach, Z. S., Armstrong, D.W., 2010. Separations of Cycloinulooligosaccharides via Hydrophilic Interaction Chromatography (HILIC) and Ligand-Exchange Chromatography. Separ Sci Technol, 45, 447-452.
- Wang, H.L., Duda, U., Radke, C.J., 1978. Solution Adsorption from Liquid Chromatography. J Colloid Interface Sci, 66, 153-165.
- Watson, A. A., Fleet, G. W. J., Asano, N., Molyneux, R. J., Nash, R. J., 2001. Polyhydroxylated alkaloids - natural occurrence and therapeutic applications. Phytoche-mistry, 56, 265-295.
- Ying, P.T., Dosey, J.G., Dill, K.A., 1989. Retention mechanisms of reversed-phase liquid-chromatography-determination of solute solvent interaction free-energies. Anal Chem, 61, 2540-2546.
- Yoshida T., 2004. Peptide separation by Hydrophilic-Interaction Chromatography: a review. J Biochem Biophys Meth, 60, 265-280.
- Yoshihashi, T., Do H.T.T.; Tungtrakul, P., Boonbumrung, S., Yamaki, K, 2010. Simple, Selective, and Rapid Quantification of 1-Deoxynojirimycin in Mulberry Leaf Products by High-Performance Anion-Exchange Chromatography with Pulsed Amperometric Detection. J Food Sci, 75, C246-C250.

NOTICIAS DE LA SECyTA

XIV REUNIÓN CIENTÍFICA DE LA SECyTA (43ª REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

Como viene siendo habitual, cada tres años la Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) se celebra en el marco de las Jornadas de Análisis Instrumental, en esta ocasión coincidiendo con la 14ª edición de ambos eventos. La celebración tuvo lugar entre el **1 y el 3 de octubre de 2014** en el Recinto Ferial Gran Vía de Barcelona dentro de la feria de EXPOQUIMIA, punto de encuentro de diversos sectores de la Química Aplicada (Biotecnología, Materias Primas, Industria y Procesos Químicos…).

La SECyTA fue la encargada de organizar el evento en colaboración con la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA) y con el apoyo de la Sociedad de Espectroscopia Aplicada (SEA), la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM) y la Sociedad Española de Proteómica (SEProt), teniendo como principal objetivo la presentación de los últimos avances en el campo de la Química Aplicada y el Análisis Instrumental. De esta forma, se estableció una excelente oportunidad para reunir y poner en contacto diferentes campos y aplicaciones de estas disciplinas.

Durante la celebración de estas jornadas destacó el impulso y la importancia que se está dando a los jóvenes investigadores, animándoles a tomar parte de forma cada vez más activa en este tipo de eventos, hecho que se refleja en el gran número de participaciones tanto comunicaciones orales como posters presentadas por jóvenes investigadores.

Otro hecho importante que puede describir esta edición fue el gran peso que se dio a las conferencias plenarias e invitadas nacionales e internacionales con un total de 10, lo que permitió contar con la prestigiosa presencia de **Marcos N. Eberlin**, Profesor de la Universidad de Campinas (Brasil), **Salvatore Fanali**, Profesor de Investigación del Consejo de Investigación Nacional Italiano (Italia), **Evgeny Katz**, Profesor de la Universidad de Clarkson (EEUU), **Jeroen Kool**, Profesor de la Universidad VU (Holanda), **Peter Schoenmakers**, Profesor de la Universidad de Amsterdam (Holanda), **Pilar Bermejo Barrera**, Profesora de la Universidad de Santiago de Compostela (España), **María Teresa Galcerán**, Profesora de la Universidad de Barcelona, (España), **Arben Merkoçi**, Profesor de Investigación del Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología (España), **María del Mar Puyol**, Profesora de la Universidad Autónoma de Barcelona, (España) y **Romà Tauler**, Profesor de Investigación del CSIC (España).

Además de estas conferencias, tuvieron lugar más de 50 comunicaciones orales y se presentaron más de 190 posters organizados en diferentes sesiones sobre análisis de alimentos, técnicas ómicas, análisis medioambiental, desarrollo de instrumentación analítica, nanotecnología, contribuciones teóricas y quimiometría, nuevos desarrollos en preparación de muestra, análisis clínico, especiación química, automatización y miniaturización en análisis químico, análisis de procesos y productos industriales. También tuvieron lugar varias sesiones de comunicaciones orales de jóvenes investigadores; la calidad investigadora y científica de los trabajos presentados se premió a través de la X edición de los premios *José Antonio García Domínguez* gracias al patrocinio de Bruker Chemical Analysis.

De esta forma se completó un programa científico de gran interés y acogida para los 260 asistentes que acudieron al evento.

En este ámbito se celebró la XIV Asamblea General de la SECyTA en la que se trataron temas de interés tales como la situación actual de la Sociedad, se destacó la buena labor realizada en la reunión anterior celebrada en Tenerife, se expuso la sede de la siguiente reunión de la SECyTA que tendrá lugar en Castellón y se procedió a la entrega de las becas para los estudiantes que asistieron al evento.

Finalmente, tuvo lugar la cena de gala en el Hotel Avenida Palace, durante la cual se rindió homenaje a 5 miembros destacados de la Sociedad: **Mª Teresa Galcerán**, **Xavier Guardino**, **Agustín Olano**, **Mercedes Ramos** y **Jesús Sanz Perucha**, concediéndoles una medalla conmemorativa como agradecimiento a su gran aporte a la ciencia y a la historia de esta Asociación. Durante esta entrega **Mª Teresa Galcerán** obsequió a los asistentes con un emotivo discurso en el que hizo un recorrido desde el nacimiento del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines hasta su trasformación en la actual SECyTA.

Por lo tanto, como conclusión de estas jornadas, la XIV Reunión Científica de la SECyTA consiguió cumplir su objetivo de establecer un ambiente idóneo de intercambio de conocimientos e inquietudes entre los asistentes, despertando más interés, si cabe, en la Química Analítica. Todo ello fue posible gracias al gran esfuerzo realizado por el comité de organización que logró un resultado excelente en términos científicos, organizativos y personales.

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

X EDICIÓN PREMIOS JOSÉ ANTONIO GARCÍA DOMÍNGUEZ

En el marco de las 14as Jornadas de Análisis Instrumental (XIV Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines, SECyTA) celebradas en Barcelona del 1 al 3 de octubre de 2014 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 X edición de los premios ha sido patrocinada por Bruker. El jurado encargado de fallar los premios correspondientes a las mejores comunicaciones orales estaba formado por Jordi Díaz Ferrero (presidente), Ana Mª García Campaña, Javier Moreno Andújar y Juan V. Sancho Llopis, que tras debatir los méritos científicos de las presentaciones, tomó por unanimidad los siguientes acuerdos:

1er Premio ex-aequo a la mejor Comunicación Oral (400 euros)

Comunicación: AME-OC09
Título: DEVELOPMENT OF AN ANALYTICAL METHOD FOR DECHLORANE PLUS AND RELATED COMPOUNDS IN FISH SAMPLES
Autores:
A. von Eyken, L. Pijuan, M.J. Montaña, R. Martí, J. Díaz-Ferrero
IQS Environmental Laboratory, University Ramón Llull, Barcelona, Spain

1er Premio ex-aequo a la mejor Comunicación Oral (400 euros)

Comunicación: AME-OC12
Título: PART-PER-QUADRILLION DETERMINATION OF FULLERENES IN SURFACE WATERS, SOILS, AND SEDIMENTS
Autores:
J.À. Sanchís [(1)], *C. Bosch* [(1)], *L.F. Silva* [(2)], *M. Farré* [(1)], *D. Barceló* [(1)]
[(1)] IDAEA-CSIC, Barcelona, Spain
[(2)] Centro Universitário La Salle, Canoas, Brasil

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

Comunicación: TOM-OC08
Título: HIGH RESOLUTION TANDEM MASS SPECTROMETRY AS A CHALLENGING TOOL IN BIOLOGICALLY ACTIVE COMPONENTS: BIO-PROSPECTING
Autores:
J. Rubert, K. Hurkova, M. Zachariasova, J. Hajslova
Department of Food Analysis and Nutrition, Institute of Chemical Technology, Prague, Czech Republic

En el caso de los premios a las mejores comunicaciones tipo cartel presentadas en las 14as Jornadas de Análisis Instrumental (XIV Reunión Científica de la SECyTA), el jurado, constituido por Yolanda Picó (presidenta), Mercedes de Frutos, Marinel.la Farré, Belén Gómara y Javier Santos, tomó por unanimidad los siguientes acuerdos:

1er Premio al mejor Póster (400 euros)

Comunicación: AMA-P01
Título: IN-SYRINGE DISPERSIVE LIQUID-LIQUID MICROEXTRACTION AND SILYLATION OF UV FILTERS IN WATER SAMPLES COUPLED TO GC/MS
Autores:
S. Clavijo Roa [(1)], *J. Avivar Cerezo* [(2)], *V. Cerdà Martín* [(3)]
[(1)] Laboratory of Environmental Analytical Chemistry–LQA2, University of the Balearic Islands, Palma de Mallorca, Spain
[(2)] Laboratorio de Radiactividad Ambiental, Sciware Systems, S.L., spin-off of the University of the Balearic Islands, Palma de Mallorca, Spain
[(3)] Departamento de Química, Universitat de les Illes Balears, Palma de Mallorca, Spain

2º Premio al mejor Póster (300 euros)

Comunicación: OQA-P04
Título: FIELD-FLOW FRACTIONATION AND CAPILLARY ELECTROPHORESIS OF FUNCTIONALIZED FULLERENES
Autores:
A. Astefanei [(1)], *W. Kok* [(2)], *O. Nuñez* [(1)], *M.T. Galceran* [(1)], *P. Schoenmakers* [(2)]
[(1)] Analytical Chemistry, University of Barcelona, Barcelona, Spain
[(2)] HIMS-Analytical Chemistry, University of Amsterdam, Amsterdam, The Netherlands

La entrega de los premios tuvo lugar el 3 de octubre de 2014, durante la ceremonia de clausura de las 14as Jornadas de Análisis Instrumental (XIV Reunión Científica de la SECyTA).

Belén Gómara
Secretaria de la SECyTA

1er Premio ex-aequo a la mejor Comunicación Oral (400 euros): comunicación AME-OC09

DEVELOPMENT OF AN ANALYTICAL METHOD FOR DECHLORANE PLUS AND RELATED COMPOUNDS IN FISH SAMPLES

A. Von Eyken, L. Pijuan, M.J. Montaña, R. Martí, J. Díaz-Ferrero

Dechlorane Plus (DP) is a flame retardant additive used in polymeric systems such as electrical hard plastic connectors in televisions and computer monitors, wire coatings and furniture. This product, currently classified as a high production volume chemical by the U.S. EPA, was created by OxyChem in the 70s when Mirex, another flame retardant from the same company, was banned. The existence of DP in the environment was first detected in samples from the Great Lakes in 2006. Since then, studies have been performed in order to determine the environmental behavior and presence of this compound and its main relatives: Dechlorane 602, 603 and 604. These compounds have been mainly studied in environmental matrices, such as water, air, soil and biota with monitoring purposes, but the dietary exposure to these chemicals has been hardly investigated. Thus, there is a need for the development of analytical methods for the determination of these compounds on food and feed matrices. In this work, we focus on fish samples.

The main steps of the methodology are the following: (1) addition of 13C-labelled internal standards, (2) extraction, (3) clean-up, (4) concentration (5) instrumental determination by HRGCHRMS and (6) quantitation.

Extraction was performed in Soxhlet apparatus. Several solvents (hexane, hexane:acetone 41:59 and hexane:dichloromethane 50:50) and different extraction time (3 h, 6 h, 12 h and 24 h) were tested.

Clean up was based on the purification on a multilayer silica column. However, an additional purification in a pyrenyl HPLC column was tested. Results showed that dechlorane compounds eluted between 3.5 min and 10 min, using hexane as mobile phase at 1 ml/min. Residual interferences from the matrix were discarded in the first fraction (0 to 3.5 min).

Instrumental determination was performed with an Agilent 6890N gas chromatograph coupled to an Autospec Ultima high resolution mass spectrometer, operating in the SIR mode at 35 eV (EI) and 10,000 resolving power. Two fragments for each compound were monitored in time windows. Quantification was carried out by the isotopic dilution method, based on the use of 13C-anti DP. Accuracy, precision, linearity, limit of detection and limit of quantification of the method were evaluated in real samples.

1er Premio ex-aequo a la mejor Comunicación Oral (400 euros): comunicación AME-OC12

PART-PER-QUADRILLION DETERMINATION OF FULLERENES IN SURFACE
WATERS, SOILS, AND SEDIMENTS

J.À. Sanchís, C. Bosch, L.F. Silva, M. Farré, D. Barceló

Fullerenes are carbon based nanomaterials in a hollow-spherical shape which, during the recent years, have been extensively studied from an environmental point of view. While some relevant aspects of their behaviour, fate and their ecotoxicity effects start to be well understood, their quantification in real environmental samples is still an analytical challenge, mostly because of their extremely low concentration levels of these nanomaterials. In comparison with other emerging contaminants, very few works have reported the occurrence of fullerenes in the environment. Nevertheless, characterizing their concentrations in several environmental compartments is an important task for properly assessing the real environmental risks of fullerenes.

In this work, several types of environmental matrices (river water, wastewater, soils and sediments) have been analyzed by liquid chromatography (LC), with buckyprep columns, coupled with an atmospheric photoionization source (APPI) to a high resolution mass spectrometer (HRMS) with a hybrid quadrupole-orbitrap analyzer. This instrumentation offers unique

sensitivity and selectivity and the method performance allows the detection of fullerenes in the low pg/L order in water samples. The performance of the method will be comprehensively compared with other previous methods based in electrospray ionization (ESI) and C18 based LC.

Surface water and sediments samples from two rivers from Barcelona (Spain), under high anthropogenic pressure, have been analyzed, showing concentrations of fullerenes in the pg/L order. Results about their occurrence of fullerenes, their aggregation, heteroaggregation and partition to the sediments will be exposed. In addition, the analysis of soils from Sul Catarinense (Brazil) will be presented. Fullerenes C60 and C70 were detected at pg/g concentrations in those samples which were located close to the largest fossil combustion power station in Latin America. Urban samples also exhibited significant levels of fullerenes while rural soils levels were under the limit of detection in about 50% of the samples.

1er Premio al mejor Póster (400 euros): comunicación AMA-P01

IN-SYRINGE DISPERSIVE LIQUID-LIQUID MICROEXTRACTION AND SILYLATION OF UV FILTERS IN WATER SAMPLES COUPLED TO GC/MS

S. Clavijo Roa, J. Avivar Cerezo, V. Cerdà Martín

A fully automated method for the determination of seven ultraviolet (UV) filters, commonly included in the formulation of sunscreen products, in aqueous samples is presented. The proposed method is based on the use of the in syringe dispersive liquid–liquid microextraction (DLLME) technique, coupled as front end to gas chromatography - mass spectrometry (GC–MS). This method enabled the integration of the extraction steps, derivatization and sample injection in an instrumental setup easy to operate. Derivatization with N,O-bis(trimethylsilyl)trifluoroacetamide (BSTFA) was used to increase the volatility of hydroxylated analytes and to improve sensitivity. Although BSTFA is prone to hydrolysis in presence of water and is therefore unstable in aqueous solutions, it was compatible with the DLLME process due to the kinetics of the derivatization and given that extraction of the hydroxylated UV filters is faster than the decomposition of BSTFA.

Dispersion was achieved by aspiration of the organic (extractant and disperser) and the aqueous phase into the syringe very rapidly. The denser-than-water organic droplets released in the extraction step, were accumulated at the head of the syringe, where the sedimented fraction was transferred to a loop where the ultrasonication and derivatization take place. After silylation the sedimented phase was transported to a micro-volume injection valve where finally was introduced via an air stream into the injector of the GC, through a stainless steel tubing used as interface. Factors affecting the microextraction efficiency were optimized using multivariate optimization.

HOMENAJE A VARIOS SOCIOS

El pasado 2 de octubre de 2014, durante la cena de gala de las JAI celebrada en el Hotel Avenida Palace de Barcelona, tuvo lugar la entrega de la Medalla de Honor de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines a diversos socios en reconocimiento a sus brillantes trayectorias profesionales, a su contribución al desarrollo de las técnicas de separación en nuestro país y a su implicación en nuestra Sociedad. Los homenajeados fueron:

Mª Teresa Galcerán Huguet

Catedrática de Química Analítica de la Universidad de Barcelona desde 1990 y Vicerrectora de dicha Universidad de 1978 a 1986. Empezó a trabajar con técnicas de separación durante su Tesis doctoral, realizando numerosas y destacables contribuciones al desarrollo y mejora de estas técnicas. Más recientemente se ha especializado en Espectrometría de Masas y, en concreto, en sus acoplamientos a las diferentes técnicas de separación (cromatografía de gases y de líquidos, electroforesis capilar y fraccionamiento campo-flujo) para el análisis de contaminantes emergentes en muestras medioambientales y alimentos.

En los últimos 10 años ha publicado más de 130 artículos científicos en revistas internacionales. Ha sido organizadora de congresos y ha impartido conferencias y cursos en reuniones científicas tanto nacionales como internacionales. Es la directora de un grupo de investigación denominado "Cromatografía, electroforesis capilar y espectrometría de masas" (CECEM) de la Universidad de Barcelona y coordinadora del grupo "Química Analítica. Anàlisi de contaminants" 2009 SGR 1325.

Su vida científica ha estado muy ligada tanto al Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines (GCTA) como a la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA). Ha formado parte de la junta directiva de nuestra Sociedad desde 1986 hasta 2004, primero como vocal, más tarde como Vicepresidenta y, finalmente, como Presidenta. Este último cargo lo desempeñó durante un periodo importante de la Sociedad, ya que presidió la junta directiva durante los últimos 4 años del GCTA y los 4 primeros de la SECyTA, siendo uno de sus socios fundadores. Ha sido directora de una red de Espectrometría de Masas y miembro fundador de la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM) y de la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA), de la cual fue vicepresidenta de 2004 a 2013.

Xavier Guardino Solá

Doctor en Ciencias Químicas por la Universidad de Barcelona, Máster en Ingeniería y Gestión Ambiental por la Universidad Politécnica de Catalunya, Técnico Superior de Prevención de Riesgos Laborales y Auditor de ENAC. Actualmente es el Director del Departamento de Información y Documentación del Centro Nacional de Condiciones de Trabajo del Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo. De 1972 a 1977 trabajó en el Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales (IIQAB) del CSIC, en Barcelona, donde se inició en el estudio de las técnicas de separación, realizando importantes contribuciones para el desarrollo de las mismas durante los 30 años que estuvo al frente del Laboratorio de Cromatografía de Gases y como responsable de los laboratorios de Análisis Ambientales y

Biológicos del Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo. Es autor de cerca de 150 artículos científicos y de numerosos capítulos de libro, la mayoría de ellos relacionados con las técnicas de separación.

Su vida científica ha estado muy ligada tanto al GCTA como a la SECyTA desde sus inicios. Ha formado parte de la junta directiva desde 1980 hasta 2008, primero como vocal, más tarde como Secretario y finalmente como vocal. Fue Secretario en un periodo importante, como lo fue el de la transición del GCTA a la SECyTA, siendo uno de los miembros fundadores de esta última.

Agustín Olano Villén

Doctor en Ciencias Químicas por la Universidad Complutense de Madrid y, actualmente, Profesor de Investigación del Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL), centro mixto del CSIC y la Universidad Autónoma de Madrid (UAM). Es jefe del grupo de Química y Funcionalidad de Carbohidratos y Derivados del Departamento de Bioactividad y Análisis de Alimentos, y su labor científica se desarrolla dentro del área de Ciencia y Tecnología de los Alimentos.

Desde sus inicios, sus investigaciones han estado relacionadas con la cromatografía, siendo una de sus líneas de investigación más importantes el desarrollo de métodos cromatográficos para la determinación de parámetros químicos en alimentos. Dichos estudios han permitido la selección de indicadores químicos de gran utilidad en el control de calidad de alimentos, tanto durante el procesado como en los productos terminados.

Autor de más de 200 artículos científicos, son de destacar sus trabajos sobre el análisis, mediante cromatografía de gases, de lactulosa como indicador de tratamiento térmico, así como el establecimiento de la relación lactulosa/furosina como indicador de adulteraciones de leches. En la actualidad dirige una de las líneas más prometedoras de su grupo relacionada con la obtención, caracterización y evaluación mediante diversas técnicas cromatográficas de carbohidratos con potencial prebiótico.

Mercedes Ramos González

Doctora en Farmacia y profesora de investigación del CSIC del Área de Ciencia y Tecnología de los Alimentos. Desde hace un par de años está disfrutando de su jubilación después de haber tenido una vida intensa y muy fructífera como investigadora. Los últimos años de su actividad científica se desarrolló dentro del grupo de Bioactividad y Alergenicidad de Proteínas y Péptidos Alimentarios (BIOPEP), grupo que ella misma creó y consolidó, perteneciente al Departamento de Bioactividad y Análisis de Alimentos del CIAL (CSIC-UAM).

Científica relevante, nacional e internacionalmente, sus investigaciones han estado muy relacionadas con el empleo de técnicas analíticas, habiendo sido pionera en la aplicación de métodos electroforéticos y cromatográficos avanzados y sus acoplamientos a la espectrometría de masas para la separación y caracterización de proteínas y péptidos. Es importante señalar sus contribuciones al desarrollo de metodologías innovadoras para la detección de adulteraciones en leche y productos lácteos con leche de diferentes especies, y con proteínas vegetales, suero de quesería, caseinatos, etc. Entre sus contribuciones más importantes destaca la identificación de numerosas secuencias de péptidos

Experience the quintessence

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

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

Más información www.millipore.com/ultrapure

Merck Millipore is a division of MERCK

alimentarios bioactivos de gran importancia científica y para el sector industrial.

Es autora de más de 200 publicaciones científicas, libros, capítulos de libro, artículos de divulgación y de varias patentes licenciadas para su explotación. Ha recibido prestigiosos premios a su trayectoria científica, destacando los otorgados por el Instituto Danone en 1996, por la Fundación CEOE en 2002 y por la Fundación García Cabrerizo en 2009.

Jesús Sanz Perucha

Doctor en Ciencias Químicas por la Universidad Complutense de Madrid y Profesor de Investigación *"ad honorem"* del Instituto de Química Orgánica General del CSIC. Su investigación ha estado siempre relacionada con el desarrollo de metodologías analíticas innovadoras, basadas principalmente en técnicas de separación y sus acoplamientos a espectrometría de masas (GC-MS, LC-MS, TD-GC-MS), así como en técnicas cromatográficas bidimensionales (GC×GC-ToF MS), y su aplicación al estudio de muestras de diversa naturaleza (alimentos, plantas, etc.). Asimismo, en los últimos años, ha llevado a cabo una destacada labor en el campo de la modelización del comportamiento en cromatografía de gases tanto mono- como bidimensional.

Científico de reconocido prestigio por la calidad de su trabajo y sus amplios conocimientos no sólo en el campo de la cromatografía sino también en el de la química analítica en general. Es autor de más de 140 publicaciones científicas y varios capítulos de libro, ha participado en números congresos nacionales e internacionales, en numerosas actividades de divulgación científica y es de destacar sus numerosas colaboraciones con científicos de distintos organismos de investigación.

Su vida científica ha estado muy ligada al GCTA y posteriormente a la SECyTA desde sus inicios. Ha formado parte de la junta directiva desde 1976 hasta 1994, primero como vocal, más tarde como Secretario y finalmente como Vicepresidente. Además, cabe destacar su tarea como Miembro del Comité Editorial de la Revista "Cromatografía y Técnicas Afines", editada por la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines entre 1990 y 2000 y su apoyo continuo a esta revista.

Desde el Comité Editorial queremos dar nuestra más sincera enhorabuena a todos los homenajeados.

14ª ASAMBLEA GENERAL DE LA SECyTA

La 14ª Asamblea General de la SECyTA, que contó con la asistencia de 79 socios, se celebró el día 02 de octubre de 2014, a las 17:30 h, en la sala 4.1 del recinto Gran Vía de la Fira de Barcelona (Av. Joan Carles I, 64, 08908-L'Hospitalet de Llobregat, Barcelona) con el siguiente orden del día:

1. Lectura y aprobación, si procede, del acta de la Reunión anterior
2. Informe de la Presidenta
3. Informe de la Secretaria
4. Informe del Tesorero
5. Ruegos y preguntas

Desarrollo de la sesión y acuerdos adoptados

En primer lugar, la Presidenta da la bienvenida a todos los asistentes y expresa su más sincero agradecimiento a los miembros de los Comités Científico y Organizador de la JAI 2014 por el excelente trabajo realizado.

1. Lectura y aprobación del acta de la Reunión anterior.

La Presidenta indica a los asistentes que el acta de la 13ª Asamblea General de la SECyTA está colgada en la página web de la SECyTA desde diciembre de 2013, por lo que ha habido tiempo suficiente para que la lean todos los socios. En este momento la Presidenta 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 y se pasa al punto siguiente.

2. Informe de la Presidenta.

En su informe, la Presidenta trató los siguientes temas.

2.1.Cierre de la XIII Reunión Científica de la SECyTA (Tenerife 2013)

La Presidenta de la SECyTA vuelve a expresar su agradecimiento a los organizadores, de la XIII Reunión Científica de la SECyTA que se celebró del 8 al 11 de octubre de 2013 en el Puerto de la Cruz, Tenerife, Drs. Miguel Ángel Rodríguez, Alejandro Cifuentes y Javier Hernández, y a los miembros de los Comités Científico y Organizador de la Reunión por el excelente trabajo realizado. La reunión fue un éxito tanto desde el punto de vista de la calidad científica como de participación de personal científico y casas comerciales. Hubo 161 participantes, de los cuales 55 fueron estudiantes que disfrutaron de la beca concedida por la Sociedad. El programa científico fue muy intenso, con más de 150 comunicaciones científicas, 48 de ellas en forma de comunicación oral y con 4 conferencias plenarias impartidas por excelentes y prestigiosos investigadores nacionales e internacionales. Esta Reunión también contó con una exposición comercial en la que participaron varias de las empresas más punteras en el sector de la instrumentación analítica, algunas de las cuales contribuyeron patrocinando alguna ponencia.

Por otro lado, la Presidenta informa de que, como viene siendo una tradición, durante la ceremonia de clausura de la Reunión, el día 11 de octubre se hizo entrega de los IX Premios José Antonio García Domínguez patrocinados por Bruker Chemical Analysis Division a las comunicaciones orales y carteles más destacados a juicio del jurado constituido a tal efecto. De igual manera, la empresa Sigma Aldrich entregó el accésit del premio "Club de usurarios de SPME" del que ya se cumple la séptima edición.

2.2. 14as Jornadas de Análisis Instrumental (JAI 2014).

La Presidenta informa de que esta edición de las JAI de 2014, ha estado organizada por la SECyTA en colaboración con la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA), y con el apoyo de la Sociedad de Espectroscopia Aplicada (SEA), la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM) y la Sociedad Española de Proteómica (SEProt). En esta edición se ha tratado de hacer un programa científico lo más atractivo posible y hemos podido contar con diez conferenciantes invitados, todos ellos de reconocido prestigio internacional procedentes de diversos centros de investigación que nos presentarán los aspectos más novedosos de las técnicas y el análisis instrumental en diferentes campos de aplicación.

Sin embargo el número de inscripciones (260) ha sido sensiblemente inferior a ediciones anteriores. Por ello, la Presidenta comenta que a ella le gustaría iniciar un periodo de reflexión con los socios de SECyTA respecto a la viabilidad de continuar celebrando las Jornadas de Análisis Instrumental en el entorno de Expoquimia. Esta disminución en el número de inscripciones puede resultar totalmente lógica y era previsible

Thermo SCIENTIFIC

Nuevo Lanzamiento
Chromeleon 7.2

Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™ 7.2 Chromatography Data System (CDS) es el primer software que combina separación (GC/IC/LC) y espectrometría de masas (MS) en un entorno global de empresa. **Chromeleon 7.2 CDS offe**

Una plataforma de software que permite modernizar la cuantificación en flujos de trabajo de cromatografía y MS, reduciendo errores analíticos y esfuerzos de aprendizaje • Herramientas de productividad para el procesado instantáneo de datos, detección de pico precisa y edición de informes flexible • Arquitectura encarada al futuro, escalable y flexible

Le permite utilizar su MS como cualquier otro detector de rutina.

Simplemente Inteligente

- Solicite su CD de demostración de Chromeleon 7.2 CDS en **thermoscientific.com/chromeleon**

© 2013 All trademarks are the property of Thermo Fisher Scientific Inc. and its subsidiaries.

Separación y detección

Cromatografía Líquida

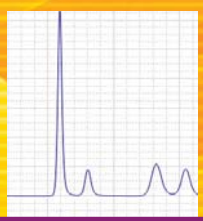
Lider en LC, UHPLC y sistemas nanoLC

Cromatografía de Gases

Multiples soluciones en GC

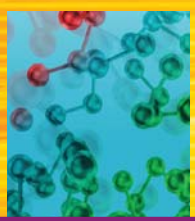
Cromatografía Iónica

Sistemas estandar, IC sin reactivos e IC capilar, del nº 1 lider mundial



Espectrometría de Masas

Sistemas precisos de identificación y cuantificación



Software Cromatográfico

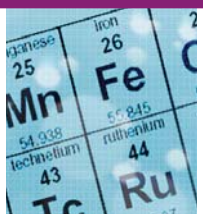
Rápida interpretación de datos y flujo de información

Prep. Muestras

Mejores extracciones en menos tiempo

Columnas y Consumibles

Proprorcionan calidad y productividad para su nuevo sistema cromatográfico



ICP-MS

Excepcional produtividad y mayor confianza

• Visite nuestra web **www.thermofisher.com** para más información

Thermo SCIENTIFIC

AD63852_E 05/13S

dada la dramática situación que la comunidad científica está sufriendo con unos recortes en los presupuestos dedicados a investigación que están asfixiando a numerosos grupos de investigación. Sin embargo, la Presidenta hace constar su temor de que hay alguna causa adicional a esta disminución en el número de asistentes. Según su opinión, el hecho de que Expoquimia, en su contexto actual, no sea tan atractiva para la comunidad científica como lo era en ediciones anteriores también puede ser una de las causas de la baja asistencia. Por otro lado, la ubicación de Expoquimia en el recinto actual la hace también mucho menos atractiva que antes cuando se celebraba en el recinto de Fira de la Plaza de España. Por parte de las Sociedades implicadas, principalmente SEQA y SECyTA, desde hace dos años están intentando negociar un cambio con Fira en el modelo actual de colaboración entre Fira y las Sociedades en la organización de las JAI.

La Presidenta pasa la palabra a los asistentes a la Asamblea y les pide que durante los ruegos y preguntas intervengan para dar su opinión como socios de SECyTA y como participantes en las JAI, sobre si estas jornadas tienen un aliciente adicional a las Reuniones Científicas de la Sociedad que normalmente tienen lugar todos los años. La Presidenta informa de que la gestión de las JAI con Expoquimia resulta muy complicada en todas las ediciones y sólo merecería la pena continuar con este sistema si a los socios les parece atractiva la actual concepción de las JAI en el entorno de la Expoquimia. Por supuesto cualquier cambio en el modelo pasaría por ponernos de acuerdo con todas las Sociedades, principalmente SEQA y SECyTA.

Por último, la Presidenta recuerda a los asistentes que se pueden enviar los trabajos presentados a las JAI como artículos a publicar en un volumen especial virtual del Journal of Chromatography A con la reseña del congreso. Las instrucciones para el envío de los artículos así como la fecha límite (10 de diciembre) están indicadas en los e-mails que han recibido desde Elsevier todos los autores responsables de una comunicación en las JAI.

2.3. Acto homenaje a Socios destacados de la SECyTA.

La Presidenta informa de que en esta edición de las JAI se llevará a cabo el homenaje a socios de la SECyTA que, por su valiosa contribución al desarrollo de la cromatografía y sus técnicas afines en España y por su brillante trayectoria científica en el campo de las técnicas de separación, han jugado un papel destacado y relevante. El acto homenaje se celebrará durante la cena de gala de estas 14as Jornadas de Análisis Instrumental que tendrá lugar esta noche. En este acto se hará entrega a los homenajeados, Mª Teresa Galceran, Xavier Guardino, Agustín Olano, Mercedes Ramos y Jesús Sanz Perucha, de una medalla conmemorativa.

2.4. X Edición de los Premios José Antonio García Domínguez.

La Presidenta informa de que la X Edición de los Premios José Antonio García Domínguez se ha convocado manteniendo un formato muy similar al de la edición anterior y pidiendo en el momento del envío del abstract que se señalara en la casilla correspondiente si se quería optar al premio. El jurado encargado de fallar dichos premios se ha escogido preferentemente entre los miembros del comité científico y organizador y el acto de entrega de los premios se realizará el viernes 3 de octubre durante la clausura del congreso.

2.5. Celebración de próximos congresos

La Presidenta anuncia a los asistentes la celebración en Castellón, en octubre de 2015, de la próxima Reunión Científica de la SECyTA (XV Reunión de la SECyTA, XLIV GCTA). La Reunión estará organizada por los Drs. Juan Vicente Sancho y Joaquín Beltrán, del Instituto Universitario de Plaguicidas y Aguas de la Universidad Jaume I de Castellón. Según presentará en unos momentos el Dr. Sancho, el congreso se celebrará del 28 al 30 de octubre de 2015 y el día anterior (27 de octubre) se celebrará el congreso de la SEEM en la misma ubicación.

3. Informe de la Secretaria.

En su informe, la Secretaria trató los siguientes temas.

3.1. Socios de la SECyTA.

La Secretaria de la SECyTA, Dra. Belén Gómara, informa de que desde la última Asamblea General, celebrada el 10 de octubre de 2013 en Tenerife, hasta hoy, 2 de octubre de 2014, se han recibido un total de 51 altas y 67 bajas. En el listado actual de Secretaría el número de socios a día de la celebración de esta Asamblea es de 503 socios.

El número de altas se mantiene en la media de los últimos años y de las 67 bajas, 31 corresponden a bajas estatutarias (debido a que el socio en cuestión lleva tres impagos consecutivos), 7 a bajas realizadas desde secretaría/tesorería al tratarse de socios de los que no se disponía de número de cuenta y con los que se intentó contactar sin éxito por todos los medios disponibles y 1 corresponde a una jubilación. El resto de bajas (28, menos de la mitad) engloban las bajas anuales habituales.

3.2. Ayudas concedidas por la SECyTA.

Se han concedido un total de 7 ayudas (de 500 € cada una) para la asistencia a congresos internacionales, distribuidos de la siguiente forma:

- 1 ayuda para la asistencia al 34th International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants (Dioxin 2014) celebrado en Madrid del 31 de agosto al 5 de septiembre.
- 6 ayudas para la asistencia al 30th International Symposium on Chromatography (ISC 2014) celebrado en Salzburgo (Austria) del 14 al 18 de septiembre de 2014.

En el caso de las 14as Jornadas de Análisis Instrumental (JAI 2014), la Sociedad ha concedido un total de 46 becas de inscripción a las JAI 2014 (que han supuesto un total de 8.280 €) y 28 ayudas de viaje (4.900 €) a jóvenes investigadores socios de la SECyTA que se desplazasen desde fuera de Barcelona.

3.3. Colaboración de la SECyTA con otros congresos.

La SECyTA colaboró en la celebración del 41st International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques (HPLC 2014) celebrado en Nueva Orleans (Estados Unidos) del 11 al 15 de mayo de 2014. La colaboración consistía en la concesión de ayudas para la asistencia a dicho congreso apareciendo el logo de la Sociedad en la parte de "Travel Grants" de la web del HPLC 2014. Sin embargo, no se solicitó ninguna ayuda para este congreso.
Igualmente, la SECyTA colaboró con la celebración del 34th International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants que se celebró en Madrid del 31 de agosto al 5 de septiembre concediendo la ayuda de asistencia a congresos internacionales mencionada anteriormente y apareciendo el logo de la Sociedad en la parte de "Sponsors & Partners" de la web del Dioxin 2014

3.4. Temas Generales.

Este año, muchos de los esfuerzos de la secretaría se han centrado en la organización científica y técnica de las JAI 2014.

Así mismo, también se ha trabajado en el diseño, montaje, supervisión, etc. de la nueva página web que estará activa a la mayor brevedad posible.

Como ya ha comentado la Presidenta, en la reunión de la Junta de Gobierno del 27 de febrero de 2014 celebrada en Madrid, también se aprobaron las nuevas bases para la X Edición de los premios José Antonio García Domínguez (patrocinados por Bruker).

3.5. Publicidad de eventos.

A través de la página web, de mailings desde la secretaría de la Sociedad, de la distribución del Boletín, etc. se han publicitado los siguientes eventos:

- 18 congresos internacionales: 16th International Congress of the National Center for Scientific Research (CNIC'2015); 1st International Conference on Truffle Research'14; HPLC 2014; Dioxin 2014; SPICA2014; microTAS 2014; ISSS 2014; SFC 2014; International Symposium on GPC/SEC and Related Techniques; 9th International Symposium on Recent Advances in POPs Analysis; BFR 2014; HTC-13 / HTSP-3; 4th GPE; MSB 2014; 38th International Symposium on Capillary Chromatography and 11th GCxGC Symposium; ExTech 2014; PREP 2014; 10th Annual LC/MS/MS Workshop on Environmental Applications and Food Safety
- 2 cursos de especialización
- 3 ofertas de contratos/becas
- 2 máster universitarios
- 1 webinar de casas comerciales

3.6. Próximos congresos.

Los congresos que se celebrarán durante los próximos años en los que están implicados de alguna manera la Sociedad o alguno de sus socios son los siguientes:

- 25th Annual Meeting SETAC Europe. Barcelona. 3 – 7 de mayo 2015. Chairs: Drs. Damià Barceló and Carlos Barata
- Reunión Científica SEEM. Castellón. 27 de octubre 2015. Chairs: Drs. Juan V. Sancho Llopis y Joaquim Beltrán Arandes
- XV Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines. Castellón. 28 – 30 de octubre 2015. Chairs: Drs. Juan V. Sancho Llopis y Joaquim Beltrán Arandes

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 Tenerife el 10 de octubre de 2013 (del 07-10-2013 al 30-09-2014) indicando que el balance es positivo.

AIR LIQUIDE

Creative Oxygen

Alphagaz CO_2 SFC, la oferta de Air Liquide para cromatografía de fluidos supercríticos.

Air Liquide le ofrece a la industria farmacéutica la solución para sus necesidades de CO_2 líquido.

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

Alphagaz CO_2 SFC cumple con la farmacopea europea y se adapta a todos los equipos de SFC.

Confíe sus necesidades de CO_2 líquido a Air Liquide ya que cuenta con una amplia experiencia y tecnología patentada fiable y simple.

Air Liquide, líder mundial de los gases, tecnologías y servicios para la industria y la salud. Gracias a su capacidad de innovación, a la proximidad con sus clientes y a las relaciones a largo plazo impulsa el progreso de la industria.

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

AL Air Liquide España, S.A.
Paseo de la Castellana, 35 / 28046 Madrid / Tel.: 91 502 93 00 / www.airliquide.es

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

- Algunas empresas se han dado de baja como empresas protectoras y/o asociadas en el último año, pero los ingresos en este apartado siguen siendo importantes.
- Las cuotas de socios se van regularizando y cada vez hay menos impagos.
- Se ha incluido un ingreso en el concepto de "Gastos Junta" que corresponde al cierre de una cuenta antigua que pertenecía a la Sociedad según se comentó en la pasada Asamblea celebrada en Tenerife.
- Los ingresos son algo mayores de los previstos ya que durante 2014 se ha cobrado de Fira la cantidad destinada a la organización de las JAI 2014 y, sin embargo, todavía no se ha pasado ningún gasto excepto una pequeña provisión de fondos que se hizo al iniciar a la organización con la secretaría técnica (Grupo Pacífico).
- Queda pendiente contabilizar la segunda cuota de las becas para la asistencia a congresos internacionales ya que dichos congresos se han celebrado muy recientemente.

A continuación, el Tesorero presenta el balance económico de la XIII Reunión Científica de la SECyTA celebrada en Tenerife en 2013.

Destacar que se ha incluido en el balance el total de las becas de inscripción que se dieron a los estudiantes socios de la SECyTA para la asistencia a este congreso y que las ayudas de viaje quedan contabilizadas a cargo únicamente de la Sociedad.

Así mismo, el Tesorero presenta a continuación los gastos para la Sociedad derivados de la celebración de la XIII Reunión Científica de la SECyTA, teniendo en cuenta las becas de inscripción y ayudas de viaje concedidas y los premios José Antonio García Dominguez.

El Tesorero informa de que, a día de hoy, toda la operativa bancaria es correcta. El paso a transferencias SEPA se ha realizado sin problema ya que la propia aplicación del BBVA permitía calcular los números IBAN de todas las cuentas corrientes de los socios. En cualquier caso, en los próximos meses se actualizará, junto con la Secretaría, la hoja de inscripción de nuevos socios para sustituir el antiguo código de cuenta corriente por los nuevos datos de IBAN tanto de la Sociedad como de los socios.

Por otro lado, el Tesorero informa de que se ha podido eliminar la multa que nos había impuesto Hacienda por un problema a la hora de realizar la declaración del IVA. Al recibir la multa se hizo un escrito desde la Tesorería alegando los motivos en la demora de la presentación del IVA, recibiendo el visto bueno y, por tanto, la retirada de la multa por parte de Hacienda.

Igualmente, comenta que la fecha de cobro de las cuotas de los socios ya está completamente normalizada y establecida en los meses de enero-febrero del año en curso.

Como se ha comentado anteriormente, se ha conseguido una reducción significativa del número de impagados bancarios pasando de 59 impagados en 2012 a 11 impagados en 2013 y 12 impagados en el presente año (2014).

Así mismo, el Tesorero quiere hacer constar que a día de hoy, los listados de Secretaría y Tesorería son completamente iguales.

Y por último, como se ha comentado anteriormente, mencionar que alguna casa comercial se ha dado de baja en 2014 pero los ingresos por las cuotas de empresas siguen manteniéndose más o menos en valores normales.

5. Ruegos y preguntas

En este punto del orden del día, la Presidenta da la palabra al Dr. Juan Vicente Sancho para que presente a los socios los datos sobre la organización de la próxima Reunión Científica de la SECyTA en Castellón.

A continuación se abre el turno de ruegos y preguntas y la Dra. Mercedes de Frutos interviene para comentar que en su opinión se debería dedicar más tiempo dentro del programa científico a los posters. Quizá el número de comunicaciones orales es demasiado alto por lo que se podrían reducir permitiendo así aumentar el tiempo dedicado a los posters. A este respecto también interviene la Dra. Mª Teresa Galceran expresando su opinión en el mismo sentido, y que se debería intentar aumentar el tiempo dedicado a los posters en reuniones sucesivas ya que se presentan muchos trabajos de muy buena calidad en formato póster y no sólo como comunicaciones orales.

La Presidenta contesta que ciertamente el número de posters es muy elevado y quizá el tiempo disponible para poder visitarlos y debatir con los autores queda corto.

La Dra. Mercedes de Frutos continúa su intervención preguntando si se van a seguir celebrando más ediciones de las JAI, teniendo en cuenta lo expuesto

por la Presidenta sobre la complejidad en la organización de las JAI y el poco éxito de asistencia. En este punto se abre un debate con la Presidenta sobre los inconvenientes previamente descritos.

En este punto del orden del día y a la vista de que no hay más ruegos ni preguntas ni más asuntos que tratar, la Presidenta da por finalizada la 14ª Asamblea General de la SECyTA a las 19:05 h. del citado día, de todo lo cual doy fe como Secretaria y firmo la presente con el VºBº de la Presidenta.

Barcelona, 02 de octubre de 2014

Fdo.:
Belén Gómara Moreno
Secretaria de la SECyTA

VºBº:
Mª José González Carlos
Presidenta de la SECyTA

NUEVOS SOCIOS DE LA SECyTA

1762
Lamas Castro, Juan Pablo
Xaquín Lorenzo, 18 4º B
15895 MILLADOIRO-AMES (A CORUÑA)

1763
Marsol Vall, Alexis
Roca Sastre, 6
252016 GUISSONA (LLEIDA)

1764
Jiménez Morillo, Nicasio Tomás
Rosario, 58
41520 EL VISO DEL ALCOR (SEVILLA)

1765
Muñoz Mena, Rocío
Universidad de Granada
Campus Fuentenueva, s/n
18071 GRANADA

1766
del Pino Rius, Antoni
Paseig de Ronda, 6 4ºD
25002 LLEIDA

1768
González Pérez, José Antonio
Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología de Sevilla (IRNAS-CSIC)
Avda. Reina Mercedes, 10
41012 SEVILLA

1769
Sánchez Rivera, Laura
Ctra. del Plantío, 17
28221 MAJADAHONDA (MADRID)

1771
Pello Palma, Jairo
Hernán Cortés, 26 2ºB
33403 AVILÉS (ASTURIAS)

1772
Trabalón Escoda, Laura
Camí de la Font, 3
43393 ALMOSTER (TARRAGONA)

1773
Lliberia Blasco, Josep Lluís
Secció de cromatografía
Institut Quimic de Sarriá
Vía Augusta, 390
08017 BARCELONA

JUBILACIÓN DE JESÚS SANZ PERUCHA

Jesús Sanz comenzó su andadura científica en el Instituto de Química Orgánica General (IQOG) del CSIC en los años 70, realizando su Tesis Doctoral bajo la dirección de los Dres. J. Calderón y M.V. Dabrio sobre la modelización de la retención en Cromatografía de Gases. Con el fin de especializarse en Espectrometría de Masas (MS), realizó una estancia en el University College Cardiff (Reino Unido) con el Prof. David Games, contribuyendo posteriormente a la aplicación de esta técnica dentro del IQOG. Atrás quedan aquellos tiempos en los que los equipos de MS ocupaban una habitación entera, y los espectros obtenidos en papel fotográfico se medían a mano y con poca luz.

Tras su reincorporación al CSIC, y junto con el Dr. Manuel Dabrio, la Dra. Isabel Martínez-Castro y María Isabel Jiménez Vacas, empezó a trabajar en el desarrollo de columnas capilares de Cromatografía de Gases. Los cientos de columnas desarrolladas con distintas fases estacionarias contribuyeron al estudio de mezclas complejas presentes en un sinfín de muestras variadas en cuyo análisis se fue viendo involucrado a lo largo de los años. Otra de sus líneas de investigación se centró en el desarrollo de métodos mediante GC-MS y TD-GC-MS para el estudio de la composición volátil de aceites esenciales y plantas; siendo uno de los investigadores más destacados en este área. A finales de los años 90 abrió su campo de investigación a la Cromatografía de Líquidos acoplada a Espectrometría de Masas, siendo el impulsor de su uso en el Centro de Química Orgánica "Manuel Lora Tamayo".

Aún más destacable es su experiencia en el empleo de técnicas quimiométricas, no sólo para la validación de métodos, sino para la resolución de diversos problemas analíticos como la mejora de la precisión, estudios de recuperación y modelización, etc. En los últimos años, su labor investigadora se ha extendido al empleo de técnicas innovadoras multidimensionales, tales como la Cromatografía de Gases Bidimensional Completa (GC×GC-ToF MS), desarrollando diversos programas para la estimación de la respuesta cromatográfica por dicha técnica. Además de estas líneas propias de investigación, Jesús Sanz ha contribuido a través de numerosas colaboraciones con investigadores tanto del IQOG, como de otros centros del CSIC y organismos de investigación, al análisis de muestras complejas (suelos, extractos de plantas, alimentos, etc.) mediante técnicas cromatográficas con distintos objetivos.

Sus logros científicos a lo largo de su dilatada y fructífera carrera investigadora en el CSIC son numerosos. Posee una elevada productividad científica de calidad contrastada, que le ha permitido ganarse un prestigio y un liderazgo reconocidos por el mundo científico y empresarial en temas relacionados con las separaciones cromatográficas.

Ha participado siempre de forma muy activa en nuestra Sociedad, desde sus inicios como GCTA, desempeñando distintos cargos tanto en la Junta Directiva (Vocal, Secretario y Vicepresidente), como en el Comité Editorial de la Revista "Cromatografía y Técnicas Afines".

Jesús ha sido investigador de referencia para muchos de nosotros, no sólo en el campo de la cromatografía y espectrometría de masas, sino en el de la química analítica en general. Podríamos definir a Jesús como un investigador "multidisciplinar", capaz de encontrar una solución adecuada para cualquier reto científico que se le plantee. Su dedicación, perseverancia y amplios conocimientos despiertan en los que están a su alrededor una profunda admiración.

Por último, es imposible dejar de mencionar como una de sus principales características su gran calidad humana y su disponibilidad en todo momento para ayudar a resolver cualquier problema técnico, de investigación o de gestión que surja a cualquier persona, sea o no de su entorno. Su enorme capacidad de diálogo, su sentido del humor y su facilidad para difundir la ciencia a la sociedad, junto con su enorme dedicación a la formación de jóvenes investigadores, merece también destacarse.

¡¡Gracias Jesús por todos estos años
de vivencias compartidas!!

María Luz Sanz
Ana Cristina Soria
María José González
Isabel Martínez Castro

IN MEMORIAM: PROF. GEORGE GUIOCHON

Ha muerto el Prof. George Guiochon. (Nantes 1931). No vamos a hacer una descripción de su dilatada e intensa carrera científica que, por otra parte, es bien conocida por los cromatografistas y químicos analíticos en general. Solo señalar que tuvo siempre la percepción suficiente del estado de la cuestión para detectar las fronteras de las Ciencias de la Separación y abordar los problemas que se planteaban. Como consecuencia, realizó una gran contribución de nuevos conocimientos para solucionar la más diversa gama de temas, como puede comprobarse consultando su enorme cantidad de publicaciones (1100, entre otras 470 Analytical Chemistry y 380 Journal of Chromatography).

Empezó su carrera científica en la École Polytechnique de París (1954), de la mano del Prof. L. Jacqué, que fue quien le animó al estudio de la Cromatografía de Gases, por aquella época descubierta por James y Martin (1952). Sus primeros estudios fueron sobre los gases resultantes de la descomposición térmica del nitrato de amonio, concretamente sobre la separación de óxidos de nitrógeno, CO y CO_2. Dichos estudios fueron un inicio y estímulo para el resto de su carrera cromatográfica y científica. Durante el año académico 1984-1985 recibió una magnífica oferta de la Universidad Georgetown, y a partir de esa fecha se estableció en los Estados Unidos como profesor de la mencionada Universidad y posteriormente en la de Tennessee y el Oak Ridge National Laboratory, donde han transcurrido los últimos 33 años de su carrera científica, hasta el día de su muerte a los 83 años, el pasado 21 de octubre.

Notable ha sido su actividad pedagógica que ha permitido crear escuela entre gran número de investigadores, entre los que nos encontramos un grupo numeroso de españoles, unos trabajando en sus tesis doctorales, otros con largas permanencias en su laboratorio y manteniendo contactos frecuentes en busca de sus consejos y orientaciones. Como consecuencia de esta labor, recibió numerosas distinciones. Miembro de honor del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines, socio de honor de la Real Sociedad Española de Física y Química, el Diploma de Honor del CSIC y Doctor Honoris Causa por la Universidad Ramón Llull de Barcelona. Recientemente en el año 2011 fue nombrado Académico Correspondiente de la Real Academia de Ciencias y Artes de Barcelona y, dos días después, Académico Correspondiente de la Real Academia de Físicas, Matemáticas y Ciencias Naturales (Instituto de España).

Algo que debemos resaltar es su papel en la gestación y consolidación del GCTA, que devino posteriormente en la SECyTA. En un Congreso Internacional de Cromatografía (1972), celebrado en Montreaux (Suiza), coincidimos cierto número de españoles. El Prof. Guiochon nos animó a crear un Grupo o Sociedad de cromatografistas, que nos capacitaría para llevar una futura edición de dicho congreso a España. Este fue el inicio de la dinámica que comenzó con la creación del GCTA en el seno de la Real Sociedad Española de Química, la organización del X Simposio Internacional de Cromatografía en Barcelona, la consolidación, crecimiento e internacionalización del grupo, como tal y como sociedad independiente, la creación de las Jornadas de Análisis Instrumental (JAI) en colaboración con otros grupos y sociedades, y con el patrocinio de la Fira de Barcelona. En todas estas actividades hemos contado siempre con el apoyo y colaboración inestimables del Prof. Guiochon.

Ha desaparecido un gran científico y un gran amigo de España, a la que siempre estuvo encantado en venir cuando se le requirió. Nos unimos al dolor de su familia y de la gran cantidad de amigos que cosechó durante su vida. Descanse en paz.

Francesc Farré y Manuel V. Dabrio

ESTADÍSTICAS DE FUNCIONAMIENTO DE LA WEB www.secyta.org

La página web de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) está operativa desde el año 1998, estrenada bajo la denominación anterior de Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines (GCTA) de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) y dependiente de la web del Instituto de Química Orgánica General del CSIC (citada en el volumen 19, número 2 de la revista CTA). Hasta este momento, la página ha tenido dos remodelaciones completas desde aquella voluntariosa primera versión: la primera, en 2003, y la segunda, a finales de 2008, ya con dominio propio. La perspectiva que nos da el tiempo transcurrido nos permite poder hablar de un cambio en su aspecto según las modas o tendencias del momento, que en esto de los diseños de páginas web también existen. Entre algunos detalles que ha cambiado, o casi desaparecido, se encuentra la inserción de un contador que nos da idea del número de visitas. Se trata de un aditamento muy valorado en un principio, pero que fue cayendo en desuso con las modas, y que más que desaparecer, se ha ocultado. En ayuda de esa necesidad de informarnos del número de visitas a nuestra web, han venido diferentes sistemas que, además, nos amplían enormemente esa información.

Desde la última renovación de hace 6 años, www.secyta.org cuenta con la asistencia de Google Analytics para llevar a cabo el estudio de las llamadas estadísticas, que contemplan mucho más que el mero recuento de visitas a un portal web. Con esta herramienta podemos conocer también si esas visitas proceden de usuarios reincidentes o son nuevos usuarios; la procedencia de la fuente (dirección escrita manualmente en el navegador, a través de un buscador, a través de una web de referencia, etc.); el país e incluso la ciudad desde la que se accedió; el idioma empleado; si ha habido interacción con la página web o ha sido una mera toma de contacto sin mayor transcendencia; el tipo de navegador empleado; incluso las visitas desde teléfonos celulares con indicación expresa del tipo sistema operativo empleado.

A modo de pequeño resumen informativo, aquí se recogen los datos de estas estadísticas correspondientes a los últimos 18 meses, período transcurrido entre el 1 de junio de 2013 y el 24 de noviembre de 2014 (**figura 1**).

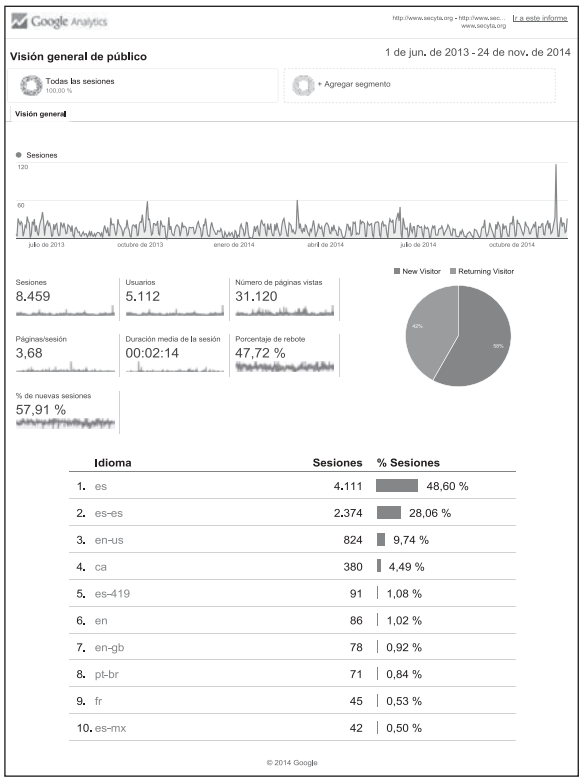


Figura 1. Resumen general de los datos ofrecidos por Google Analytics para la web www.secyta.org en el período transcurrido entre el 1 de julio de 2013 y 24 de noviembre de 2014.

Durante este espacio de tiempo, ha habido un total de 8.459 sesiones (o accesos a la web) correspondientes a 5.112 usuarios, considerando tanto a los nuevos como a los recurrentes (de más de un acceso a la misma). El porcentaje de nuevas sesiones, es decir, visitas realizadas por primera vez, ha sido del 57,91 % (4.899 sesiones) y el porcentaje de rebote (porcentaje de visitas a una sola página o que ha abandonado desde la misma página en la que se accedió) ha sido de 47,72% como media de las visitas efectuadas por primera vez o de rebote (3.560 sesiones). En total se han visualizado o visitado 31.120 páginas, comprendiendo las visitas reiteradas a una misma página, con un promedio de 3,68 páginas vistas en cada sesión (incluidas las repetidas), con una duración media de 2 minutos y 14 segundos.

A lo largo de todo este período, los días que más visitas se contabilizaron fueron el jueves 13 de

noviembre de 2014, con 117 sesiones, seguido del martes 4 de marzo de 2014, con 61 y el martes 8 de octubre de 2013, con 59. En relación a las visitas acumuladas a lo largo de todos los días del mes, el mes de octubre de 2013 fue el que más visitas recibió, con 663, seguido de junio de 2013, con 595, junio de 2014 con 576 y el mes de noviembre de 2014, con 552 (teniendo en cuenta que para elaborar este informe, se cerró el recuento estadístico el 24 del mes en curso).

Este sistema permite también determina los idiomas que utilizan los usuarios o visitantes. Hay que aclarar que este parámetro registra el idioma con el que los usuarios tienen configuradas las preferencias regionales de sus ordenadores y obedece a los códigos establecidos. En nuestro ejemplo, el idioma más empleado ha sido el español con alfabetización internacional) con 4.111 sesiones (48,60%), 2.374 sesiones (28,06%) de español con alfabetización tradicional), 824 sesiones (9,74%) de inglés de los Estado Unidos, 380 sesiones (4,49%) de catalán y 91 sesiones (1,08%) de español de Hispanoamérica. Un menor número de sesiones se han registrado en inglés británico (77), portugués de Brasil (71), francés (45) y de español de Méjico (42).

Los 10 países desde los que más se visitaron la web fueron España, con 6.212 sesiones (73,4% del total), seguido de Suecia (347 sesiones, 4,10%), Méjico (308 sesiones, 3,64%), Argentina (142 sesiones, 1,68%), Colombia (140 sesiones, 1,66%), Alemania (108 sesiones, 1,28%), Perú (100 sesiones, 1,18%), Chile (84 sesiones, 0,99%), Reino Unido (80 sesiones, 0,95%) o Brasil (73 sesiones, 0,86%). Sin embargo, merece destacar algunas procedencias que llaman la atención, como las de Vietnam, India, Japón, china, Taiwán, Sudáfrica, Irán, Arabia Saudí, Australia, Kenia, Filipinas, Tailandia, Camerún, Etiopía, Indonesia o Camboya.

Por ciudades, esta distribución está encabezada por Madrid (1.924 sesiones), Barcelona (864 sesiones), Umea (Suecia, 319 sesiones), origen desconocido, 287), Santander (263 sesiones), Granada (166), Valencia (165), Sevilla (145), Valladolid (144) y Tarragona (140) entre las diez primeras.

También se sabe el origen de la entrada en la web. La mayoría fue utilizando el buscador Google, empleado en 4.576 sesiones (69,85%), o bien directamente, tecleando la dirección url, en 2.094 sesiones (24,75%). También, a través de otros buscadores menos utilizados, como Bing, Yahoo, Getpocket o a través de páginas web en las que hacen referencia a la SECyTA. Las búsquedas se han llevado a cabo mediante la introducción de palabras clave tales como SECyTA, SECyTA 2013, con la url completa (www.secyta.org), cromatografia (sin acento), cromatografía (con acento), cursos cromatografia, secyta Tenerife, etc.

Los navegadores más empleados han sido Chrome (44,97%), Internet Explorer (25,00%), Firefox (20,90%) o Safari (4,44%). Curiosamente el navegador de Android (3,27%) se empleó más veces que Opera (0,50%) y Mozilla (0,24%). Windows es con diferencia el sistema operativo de ordenador que más se ha usado (86,70%), frente a Android (5,04%) y McIntosh (4,63%), IOS (2,48%) o Linux (0,82).

Desde los teléfonos móviles, el sistema de Android (63,58%) e IOS (31,34%) dominan este apartado, quedando muy alejado Windows Phone (1,94%) y otros sistemas prácticamente residuales.

También nos es posible hacer una pequeña disección de los datos en cuanto a la distribución de las sesiones. Como ya se ha dicho al principio, hubo 4.899 sesiones nuevas o nuevos visitantes, correspondiendo a 17.735 páginas visitadas. El resto hasta las 3.560 restantes, fueron reincidentes. Pero también podemos conocer la distribución de estas sesiones reiteradas. De esta forma, sabemos que 896 usuarios visitaron la web en dos ocasiones o 388 en tres ocasiones, 231 en cuatro ocasiones, 177 en cinco, 127 en 6, 98 en 7 y 86 en 8.

Además, también podemos ver que 4.728 sesiones tuvieron una duración de entre 0 y 10 segundos, 750 de entre 11 y 30 segundos, 626 de entre 31 y 60 segundos y 1029 sesiones de entre 61 y 180 segundos. Hay que resaltar que entre 10 y 30 minutos ha habido 475 sesiones, alcanzándose 81 sesiones de 30 o más minutos.

En definitiva, Google Analytics es una herramienta útil y versátil, que si bien con carácter general permite extraer una información meramente estadística que cubre la curiosidad de los webmasters, también puede ser empleada como herramienta por empresas que necesiten, por ejemplo, llevar a cabo estudios de prospección de mercados para la introducción de un nuevo producto, posibilidades que se alejan de las pretensiones de la web de SECyTA.

Mario Fernández
Instituto de Química Orgánica General (CSIC)

INFORMACIONES

34th EDITION OF THE INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON HALOGENATED PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS (DIOXIN)

The 34th Edition of the International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants (DIOXIN) was held in Madrid (Spain) from 31st August to 5th September 2014. The organizing committee was formed by five researchers of the Institute of General Organic Chemistry of the Spanish National Research Council (CSIC) and led by Dr Begoña Jiménez from the same institution.

The Symposium offered a high quality scientific programme with presentations on the most recent advances in all areas of halogenated persistent organic pollutants (POPs), such as analysis, monitoring, risk assessment, etc. Around 1000 communications (posters and oral presentations) were presented on both traditional topics and emerging issues.

Oral communications presented from Monday to Thursday were split into fifty different sessions, and every day five parallel sessions were scheduled at a time. Furthermore, every morning the conference was started with a plenary session by a well-known scientist in the area of POPs, including, inter alia, Prof Joan Grimalt (CSIC, Barcelona, Spain) on Monday and Dr Antonia Calafat (Centers for Disease Control and Prevention (CDC), Atlanta, USA) on Tuesday.

The topics of the presentations were very diverse, including: the occurrence and monitoring of pollutants in different ecosystems or environments (marine and terrestrial ecosystems, remote areas, etc); their modelling, intake evaluation and risk assessment, and other interesting sessions about trends, sources and fate of these pollutants. Moreover, presentations involving emerging POPs end even some pseudo-POPs were also held, such as that entitled 'pseudo-POP: Non persistent but persistenly in the environment', in which pyrethorids, cyclic volatile methyl siloxanes, polycyclic aromatic hydrocarbons, and halogenated carbazoles were presented as potential pseudo-POPs.

Regarding the social program, it was very carefully programmed and included some innovations. First of all, on Sunday, before the reception, it took place the first edition of the session 'Science with Tapas', where students had the opportunity to interact with several distinguished scientists and to have some informal discussions on science with them. The following day, on Monday, the official reception was held in the Retiro Park, in the very centre of Madrid. Additionally, and as usual, the social agenda included a Gala dinner. It was programmed on Thursday in the Casino de Madrid, one of the listed buildings of National Cultural Interest.

On Friday, and as a novel initiative, some students and mentors were encouraged to share their research interests within a relaxing and easy-going atmosphere. After that, the Otto Hutzinger awards were given to the best oral and poster communications. Finally, Dr Begoña Jiménez closed the ceremony thanking all the attendees to this Edition of the DIOXIN conference, and encouraging them to attend DIOXIN 2015, which will be held in São Paolo (Brazil).

Cayo Corcellas i Carramiñana
Institute of Environmental Assessment and Water Research (IDAEA-CSIC)

ISC 2014 - 30th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON CHROMATOGRAPHY

The ISC congress is the most traditional conference regarding chromatography and other separation sciences, probably with the broadest coverage of topics. It is a biennial congress and this year it took place between September 14th - 18th in Salzburg. Five days with a schedule full of plenary, keynote, tutorial and research lectures, poster presentations, vendor seminars and exhibitions of the latest instrumentation from well-known manufacturers. 33 different sessions containing 8 plenary lectures, 27 keynotes and 81 oral presentations and 4 vendor seminars were presented. Concerning the poster sessions, 571 communications were presented in three different sessions (Monday, Tuesday, and Wednesday). It has to be highlighted the high quality of the communications presented, spanning different aspects of separation techniques, extraction techniques, metabolomics approaches, applicability to clinical diagnostics, etc. Therein, researchers from all over the world had the opportunity to present, share and discuss their latest results with the rest of participants. Several international renowned scientists composed the scientific committee and the meeting was chaired by Prof. Wolfgang Buchberger, from the Johannes Kepler University of Linz (Austria), and Prof. Michael Lämmerhofer from the Eberhard Karls University of Tübingen (Germany). The honorary chair was Prof. Wolfgang Lindner from the University of Vienna (Austria).

The ISC 2014 meeting began a rainy Sunday morning with three parallel short courses. The first one, whose aim was the presentation of the current trends in clean-up of biomatrices for analysis of small molecules; the second one was centered in UHPLC method development and quality-by-design; and the third one was focused on fundamentals and trends in mass spectrometry. In the afternoon, the Opening Ceremony started with an enjoyable concert and then, an introduction to the congress was presented. Next, the Fritz-Pregl Medal Award was given to Prof. Pat Sandra for his extensive contributions in the field of separation sciences comprising different aspects going from research and methodological developments until education. Subsequently, Prof. Sandra gave an interesting lecture about advances in biopharmaceutical analysis. Then, another plenary talk was carried out by the hand of Dr. Jeremy Nicholson who introduced us to the analytical challenges of systems medicine and molecular phenotyping. To conclude this first session, Prof. Lämmerhofer was awarded with the Jubilee Medal for his contribution to the development of chromatographic science. To complete this day the welcome reception took place in the exhibition area, where a buffet with all kinds of delicious foods were offered to all the participants.

Next morning started with session 2 which was divided in two main parts; the first one focused on small-sized monolithic silica and particulate columns for reversed-phase LC and the second one centered in the applicability of high-resolution MS in clinical and forensic toxicology analysis. After the coffee break, 3 parallel Sessions (Sessions 3, 4 and 5) as well as one Tutorial (Tutorial 1) were carried out. Session 3 was mostly focused on recent approaches in stationary phases materials and their applicability in HPLC and GC. At the same time, in the Session 4, a brief overview of the importance of HPLC-MS/MS and GC-MS/MS in the field of clinical diagnostics and diseases prevention took place. Moreover, in Session 5, theoretical aspects concerning retention behavior in reverse-phase, HILIC, core-shell or monolithic columns were discussed. In Tutorial 1, with Prof. Dr. Luigi Mondello as speaker, theory and practical aspects of comprehensive two-dimensional GC-MS as well as recent advances in instrumentation were presented. In the afternoon, three parallel sessions (Sessions 6, 7 and 8) and two Tutorials (Tutorial 2 and 3) were performed. Session 6 was dedicated to the discussion of selectivity enhancement in MS, the relation between chromatographic resolution and limit of detection in HPLC-MS and the quantification of co eluting compounds. Session 7 was centered in the versatility of MS in the determination of peptides, pharmaceuticals and lanthanides-polyaminocarboxilic acid complexes. On the other hand, in Session 8, people were invited to learn a little bit more about the points highlighted in Session 5. Tutorials 2 and 3 were designed for people interested in SFC and comprehensive two-dimensional LC. On Monday evening, after the first poster exhibition, we were invited to a classical concert in the Salzburg Residence, where the "Cavalieri Quartett" played three pieces, "Streichquartett in D-Dur„Lerchenquartett", Op.64, Nr. 5 of Joseph Haydn, "Romanze aus dem Streichquartett Nr. 1" of Sergei Rachmaninoff and finally "Streichquartett in G-Dur, KV 387" of one of the most representative persons in Salzburg, Wolfgang Amadeus Mozart.

On Tuesday, the congress started with three parallel Sessions (Sessions 9, 10 and 11) and two Tutorials (Tutorials 4 and 5). These were focused on separation methodologies at nano/micro scales considering a variety of modern chromatography and electrophore-

tic techniques as well as the recent trends in sample preparation with applications in different fields such as food, bioanalytical, biopharmaceutical, clinical and toxicological. After the coffee break, three more parallel Sessions (Sessions 12, 13 and 14) and one Tutorial (Tutorial 6) were carried out. The Sessions 12 and 14 provided a strong focus on the hyphenation of separation technologies such as LC and CE with MS for the analysis of biopharmaceuticals and metabolomics. On the other hand, more theoretical speeches took place in Session 13, which aimed to discuss different parameters affecting the performance of the separation of analytes by means of LC (RPLC/HILIC). The Tutorial 6 was based on discussing advantages and disadvantages of HPLC and UHPLC making a comparison between these two methodologies as separation techniques employed in bioanalysis. Tuesday afternoon began with another three parallel Sessions (Sessions 15, 16 and 17) and two Tutorials (Tutorials 7 and 8), and was mostly dedicated to metabolomics and proteomics focusing on challenges and advances in chiral separations as well as on what can be achieved with ionic liquids in separation science, in particular in CE. Moreover the hyphenation of CE with MS for protein characterization and analysis as well as contribution of this approach in clinical diagnosis and monitoring were presented. On the other hand, strategies based on the hyphenation of GC with MS for metabolomics analysis were strongly addressed. The day concluded with the second poster exhibition.

Wednesday started with three parallel sessions (Sessions 18, 19, and 20). These sessions concerned diverse topics, ranging from omics approaches until multidimensional techniques, as well as discussion on separation materials. At the same time, those interested in CE and CE-MS hyphenation could attend a tutorial regarding this technique (Tutorial 9). Afterwards, sessions 21, 22, and 23 started. The latest advances and techniques on pharmaceutical analysis could be witnessed in Session 21, innovative sample preparation techniques were discussed in Session 22, and Session 23 comprised lipidomics and metabolomics studies by MS detection. In the meanwhile, Tutorial 10 was focused on the use of quantitative LC-MS for biomonitoring. Three more parallel sessions started next (Sessions 24, 25, and 26), regarding SFC, multidimensional techniques, and environmental analysis, respectively. In the meanwhile, Dr. András Guttman offered a tutorial regarding analytical and translational glycomics (Tutorial 11). Last poster session of the congress started next and by the time it finished the fifth plenary session began. Therein, Dr. Daniel Armstrong spoke about ionic liquids in separations and MS. Finally, a plenary discussion session about the potential of modern SFC platforms and its applicability started. To conclude the day, Oktoberfest conference party took place in the "Stieglkeller" restaurant, where delightful food and Austrian beer could be tasted while listening to wonderful live performed songs.

The last day of congress started with the "Blitz-Presentations" of posters nominated for the Shimadzu best poster award. Three parallel sessions started after (Sessions 30, 31 and 32). Session 30 was dedicated to the discussion on different Clinical/Biomarker analysis mainly by LC. In Session 31 Marja-Liisa Riekkola spoke about new materials in integrated air sampling and sample pretreatment, Aleksandra Zatirakha presented the application of epoxy compounds for ion chromatography and Manuel Miró spoke about on-chip sample processing based on flow programming coupled to chromatographic assay. Session 32 was focused on new trends of selectivity and miniaturization for LC and CE. The last session (session 33) comprised three plenary lectures. The first one was presented by Dr. Jonas Bergquist who spoke about analytical insights in neuromuscular degeneration. In the second plenary lecture, Govert W. Somsen presented CE-MS as a tool for the quality assessment of biopharmaceuticals and the third lecturer was Gérard Hopfgartner who spoke about the alternatives workflows applied to drug metabolism and metabolomics.

In the closing ceremony, Frantisék Svec and Wolfgang Lindner were given the Nernst-Tswett award. Also, eight Shimadzu best poster awards were given. Finally a video invitation for the next appointment of International Symposium on Chromatography was showed. The next ISC meeting will be held from 20th August to 1st September of 2016 in the University College of Cork, Ireland.

Alejandro García Vázquez, *Department of Analytical and Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona*; **Elena Sánchez López**, *Department of Analytical Chemistry, Physical Chemistry, and Chemical Engineering, University of Alcalá, Madrid*; **Estefanía González García**, *Department of Analytical Chemistry, Physical Chemistry, and Chemical Engineering, University of Alcalá, Madrid*; **Laura Vallecillos Marsal**, *Department of Analytical and Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona*; **Natalia Arroyo Manzanares**, *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Sciences, University of Granada*; **Tatiana Baciu**, *Department of Analytical Chemistry and Organic Chemistry, Department of Analytical and Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona*

CALENDARIO DE ACTIVIDADES

1. **Pittcon 2015. Conference & Exposition**
   8-12 Marzo 2015. Nueva Orleans, Louisiana (EE.UU.)
   Tel: +1 412 825 3220
   info@pittcon.org
   Website: pittcon.org/

2. **MSB 2015: 31st International Symposium on MicroScale Bioseparations**
   26-29 Abril 2015. Pudong Shanghai (China)
   msb2015@msb2015.org
   http://www.msb2015.org/

3. **SETAC Europe 2015: 25th Annual Meeting**
   3-7 Mayo 2015. Barcelona (España)
   Co-chairs: Damià Barceló y Carlos Barata
   http://barcelona.setac.eu/?contentid=767

4. **ISCC GC×GC 2015: 39th International Symposium on Capillary Chromatography and 12th GC×GC Symposium**
   17-21 Mayo 2015. Fort Worth, Tejas (EE.UU.)
   Conference Organizer: Danielle Schug
   info@isccgcxgc2015.com
   www.isccgcxgc2015.com/

5. **HPLC 2015: 42nd International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques**
   21-25 Junio de 2015. Ginebra (Suiza)
   Symposium Chair : Prof. Gérard Hopfgartner
   Congress Secretariat: Symporg SA
   Rue Rousseau 30. CH-1201 Geneve / Switzerland
   hplc2015@symporg.ch
   www.hplc2015-geneva.org/

6. **CNIC 2015: 16th International Congress of the National Center for Scientific Research**
   22-26 Junio de 2015. La Habana (Cuba)
   Presidenta Comité Organizador:
   Blanca Rosa Hung Llamos
   congreso2015@cnic.edu.cu
   www.congresocnic2015.sld.cu/

7. **Metabolomics 2015: 11th Official Annual Meeting of the International Metabolomics Society**
   29 Junio-2 Julio 2015. San Francisco, California (EE.UU.)
   www.metabolomics2015.org

8. **I3S 2015: 4th International Symposium on Sensor Science**
   13-15 Julio 2015. Basilea, Suiza
   http://sciforum.net/conference/I3S2015/

9. **PREP 2015: 28th International Symposium on Preparative and Process Chromatography**
   26-29 Julio 2015. Filadelfia, Pensilvania (EE.UU.)
   Chair: Giorgio Carta
   Honorary Chair: Georges Guiochon
   Ms. Janet Cunningham (PREP Symposium/ Exhibit Manager)
   www.LinkedIn.com/in/BarrEnterprises
   janet@barrconferences.com
   www.prepsymposium.org/

10. **ITP 2015: 22nd International Symposium on Electro- and Liquid Phase-Separation Techniques. 8th Nordic Separation Science (NoSSS) symposium**
    30 Agosto-3 Septiembre 2015. Helsinki (Finlandia)
    Chair and co-chair:
    Prof. Marja-Liisa Riekkola and Prof. Heli Sirén
    www.helsinki.fi/itp2015/

11. **Analytica 2015: 6th International Conference and Exhibition on Analytical and Bioanalytical Techniques**
    1-3 Septiembre 2015. Valencia (España)
    Organizado por OMICS Group.
    Secretaría:
    analytica@conferenceseries.net
    http://analytical-bioanalytical.pharmaceuticalconferences.com/index.php

12. **XVIII EUROANALYSIS: 18th European Conference on Analytical Chemistry**
    6-10 Septiembre 2015. Burdeos (Francia).
    Conference Co-chairs:
    Philippe Garrigues y Christian Rolando
    www.euroanalysis2015.com

13. **IMA 2015: 9th International Conference on Instrumental Methods of Analysis-Modern Trends and Applications**
    20-24 Septiembre 2015. Kalamata (Grecia)
    Chairpersons:
    Profs. John Kapolos y Maria Ochsenkühn-Petropoulou
    ima2015@teikal.gr
    www.ima2015.teikal.gr

14. **RAFA 2015: 7th Recent Advances in Food Analysis**
    3-6 Noviembre de 2015. Praga (República Checa)
    Prof. Dr. Jana Hajslova (chair) and Prof. Dr. Michel Nielen (co-chair)
    www.rafa2015.eu/RAFA_2015_1st_flyer.pdf

INFORMACIÓN BIBLIOGRÁFICA

ARTÍCULOS DE INTERÉS

PERSPECTIVAS DE LA ELECTROCROMATOGRAFÍA CAPILAR EN COLUMNAS EMPAQUETADAS COMO TÉCNICA DE SEPARACIÓN ANALÍTICA

La electrocromatografía capilar (CEC) es una técnica híbrida de separación analítica que combina la alta eficacia de la electroforesis capilar con la selectividad de la cromatografía de líquidos (LC). Se basa en el movimiento de una fase móvil a través de una fase estacionaria debido a la acción del flujo electroosmótico (EOF) e involucra dos mecanismos de separación: la retención de los analitos en la fase estacionaria y la diferencia existente entre sus movilidades electroforéticas. Las separaciones electrocromatográficas se llevan a cabo en columnas capilares de diámetro interno igual o inferior a 100 µm, y se clasifican en función de su fase estacionaria en: empaquetadas, monolíticas o capilares tubulares abiertas. La elección de columnas capilares empaquetados está muy extendida en el desarrollo de métodos de CEC debido a la amplia variedad de fases estacionarias disponibles. Sin embargo, la escasa oferta comercial y el elevado coste de los mismos, ha llevado a la mayor parte de los investigadores a preparar sus propias columnas. Como consecuencia, la habilidad manual del operador se presenta como el primer inconveniente de la CEC en capilares empaquetados.

Por otra parte, a pesar de las expectativas iniciales surgidas dentro de la comunidad científica sobre este método de separación, la implementación de la CEC en laboratorios de rutina se ha visto limitada por otros problemas. Además de las dificultades propias de la CEC (baja robustez y durabilidad de los capilares) y la falta de instrumentación comercial que permita análisis electrocromatográficos en gradiente, debe considerarse la baja sensibilidad característica de las técnicas capilares, así como el reto que supone su acoplamiento con la espectrometría de masas (MS). Aunque durante las dos últimas décadas se han presentado grandes mejoras, en la actualidad no solo se requieren soluciones para solventar los inconvenientes mencionados, sino que también es imprescindible encontrar un nuevo ámbito en el que la CEC sea competitiva como técnica de separación.

En esta revisión se resumen tres artículos de reciente publicación. Dos de ellos abordan algunos de los últimos avances experimentados por la CEC basados en el desarrollo de capilares empaquetados con fritas de partícula única y en el empleo del acoplamiento CEC-MS. Además, se incluye un tercer artículo en el que se lleva a cabo una comparativa entre la CEC y la cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), quedando definidas las perspectivas futuras de la CEC.

Performance of single particle fritted capillary columns in electrochromatography
Bo Zhang, Qing Liu, Lijun Yang, Qiuquan Wang
Journal of Chromatography A 1272 (2013) 136-140

El mayor problema de los capilares empaquetados para CEC es la presencia de las fritas que retienen la fase estacionaria, pues son el principal motivo de la formación de burbujas durante la separación. En este artículo se considera el uso de una partícula porosa como alternativa al uso de fritas obtenidas por sinterización térmica de las partículas de la fase estacionaria. Los autores proponen el siguiente procedimiento para la fabricación de capilares con fritas de partícula única. Se introduce mecánicamente una partícula de sílice de 110 µm y porosidad de 0,9 µm (frita de salida del capilar) en el interior de un capilar de 100 µm, en el que previamente se ha realizado la ventana de detección. A continuación, el capilar se rellena con partículas Spherisorb ODS1 (3 µm) a una presión de 6.000 psi, pudiendo usarse la fase móvil como solvente de empaquetamiento. Esto supone una ventaja añadida a esta innovación, pues permite equilibrar la columna capilar durante su fabricación. Tras empaquetar la columna (24 cm), se introduce una partícula de sílice por el extremo de entrada del capilar, reteniendo definitivamente la fase estacionaria.

La reproducibilidad en la preparación de los capilares se evaluó a través de la separación de una mezcla de cinco alquilbencenos, usando tiourea como marcador del EOF, llevada a cabo en diez capilares diferentes y considerando diferentes condiciones experimentales. En todos los casos, la precisión obtenida, en términos de desviación estándar relativa (DER), resultó ser inferior o igual al 7,6 % para la eficiencia de pico del amilbenceno (compuesto más retenido) y al 11,7 % para su factor de retención.

Los resultados presentados mejoran la reproducibilidad entre capilares publicada anteriormente para capilares empaquetados con la misma fase estacionaria y con fritas obtenidas a partir de la sinterización de partículas. Además, los autores destacan la gran durabilidad de los capilares. Asimismo, señalan que el flujo de la fase móvil a través de la columna es uniforme, lo que evita la aparición de burbujas durante la separación.

Pressurized nano-liquid-junction interface for coupling capillary electrochromatography and nano-liquid chromatography with mass spectrometry
Giovanni D' Orazio, Salvatore Fanali
Journal of Chromatography A 1317 (2013) 67-76

El uso de una interfase de unión líquida (L-J) ha demostrado ser una opción eficaz en el acoplamiento CEC-MS. Sin embargo, esta interfase no es comercial, lo que implica que su diseño y las habilidades del operador influyan sustancialmente en los resultados obtenidos. Con el objetivo de minimizar ambos efectos, los autores de este artículo proponen un nuevo diseño de interfase más sencillo, la interfase de nano-unión líquida (nano L-J).

Su propuesta se basa en una pequeña pieza de resina ULTEM® con una cavidad interior en forma de T invertida. La columna capilar empaquetada (100 µm d.i. x 34 cm, LiCrospher® 100 RP-18 5 µm) se coloca a través de uno de los orificios horizontales, mientras que se inserta un capilar hueco (25 µm d.i. x 5 cm) a través del otro orificio horizontal. El capilar hueco actúa como salida del sistema y por tanto debe ser alineado con el orificio de entrada al detector de MS. Ambos capilares, fijados mediante un tubo de PEEK™, confluyen en el punto de intersección de la T. Entre ellos se deja una pequeña distancia en la cual el flujo proveniente del capilar empaquetado se mezcla con el flujo del líquido adicional. El flujo del líquido adicional se suministra a través de la salida vertical de la interfase desde de un reservorio de polisulfona (7 mL) presurizado con N_2 (300 mbar). Además, en el reservorio se incorpora un electrodo de acero inoxidable que permite, al aplicar una diferencia de voltaje de ± 1,8 kV, la formación del electrospray a la salida de la interfase.

Para evaluar este nuevo prototipo de interfase para CEC-MS se consideró la separación de una mezcla de seis plaguicidas organofosforados. Los límites de detección alcanzados fueron inferiores a 6.8 µg/mL, en tanto que la repetibilidad y reproducibilidad obtenidas resultaron, en términos de DER, ≤ 4,2 % para el tiempo de retención y ≤ 14,4 % para el área de pico. Asimismo, la precisión del método, considerando la reproducibilidad entre dos analistas diferentes, fue ≤ 3,4 % para el tiempo de retención y ≤ 9,0 % para la eficiencia de pico. Resultados análogos se obtuvieron en la separación de ocho drogas ácidas de interés farmacéutico.

Aunque los resultados presentados son comparables con los obtenidos usando otro tipo de interfase L-J, el diseño propuesto presenta un manejo más simple, según los autores, demostrando una precisión satisfactoria entre diferentes operadores.

Kinetic performance evaluation and perspectives of contemporary packed column electrochromatography
Seppe De Smet, Frederic Lynen
Journal of Chromatography A 1355 (2014) 261-268

En los inicios de la CEC su potencial era la alta eficiencia alcanzada respecto a la conseguida con otras técnicas separativas. Sin embargo, actualmente se considera que el rendimiento obtenido mediante la cromatografía de líquidos de alta y ultra alta resolución (HPLC y UHPLC) es igual, e incluso mayor, a la descrita para CEC. A pesar de esta consideración, existen pocas referencias sobre el uso de herramientas que permitan una comparación imparcial de ambas técnicas. Como respuesta a este planteamiento, en este artículo se propone el uso del método de la curva cinética de rendimiento límite (KPL).

Los autores seleccionaron tres fenonas de cadena larga como compuestos de interés para la elaboración de los diagramas cinéticos. Los diagramas cinéticos para la CEC se construyeron con los resultados obtenidos a partir de la separación de las fenonas en una columna Hypersil-C18 (100 µm d.i. x 25 cm longitud efectiva, 3 µm) usando una mezcla MeCN/Tampón Tris-acetato pH 8,5 (80/20) como fase móvil. En el caso de los diagramas cinéticos de HPLC, éstos se obtuvieron a partir de la separación de las fenonas en una columna ODS Hypersil (4,6 mm d.i. x 15 cm, 3 µm) empleando la misma fase móvil que en la separación electrocromatográfica.

La representación conjunta de los diagramas ciné-

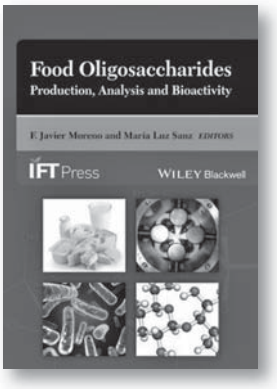
ticos de CEC y HPLC, considerando la extrapolación de las curvas de CEC a 30 kV (voltaje máximo) y las curvas de HPLC a 400 bar (presión máxima), evidenció la limitación que presenta la CEC en capilares empaquetados a favor de los métodos de HPLC. Por ejemplo, mientras la eficiencia máxima alcanzada en CEC para la octanofenona no superó los 120.000 platos, era próxima a los 200.000 platos en HPLC.

Por otra parte, en este artículo también se aborda el estudio de la temperatura de separación como un factor fundamental que influye en la eficiencia de la CEC. Los experimentos llevados a cabo mostraron que una disminución de la temperatura (desde los 25 °C hasta los 10 °C) reduce la altura equivalente de plato teórico un 24 %, aumentando la eficiencia. Aún así, ésta es aún inferior a la alcanzada en HPLC.

Finalmente, la extrapolación por parte de los autores de los resultados obtenidos, les llevó a concluir que la eficiencia de la CEC podrá ser superior a la conseguida en HPLC, siempre y cuando sea posible el empaquetamiento de capilares con partículas de 0,5 µm, o bien, si las separaciones electrocromatográficas se desarrollan bajo un voltaje aplicado de 120 kV.

Maykel Hernández Mesa
Grupo de investigación FQM-302 "Calidad en Química Analítica Alimentaria, Ambiental y Clínica", Departamento de Química Analítica. Universidad de Granada

RESEÑA DE LIBROS



Food Oligosaccharides: Production, Analysis and Bioactivity
Editado por F. Javier Moreno y María Luz Sanz
ISBN: 978-1-118-42649-4
May 2014, Wiley-Blackwell
552 pages

La creciente concienciación por la relación entre dieta y salud ha dado lugar en los últimos años a una gran demanda de productos alimenticios que proporcionen efectos beneficiosos sobre la salud más allá de su contribución nutricional. En este sentido, el desarrollo e incorporación en los alimentos de oligosacáridos bioactivos con un efecto beneficioso sobre la salud representa uno de los segmentos con mayor expansión dentro del mercado de los alimentos funcionales.

"Food Oligosaccharides: Production, Analysis and Bioactivity" es una obra de referencia completa y actualizada, que responde a la necesidad tanto por parte de profesionales del ámbito científico como industrial, de textos de referencia que cubran los más diversos aspectos relacionados con los oligosacáridos funcionales. Así, en este libro se recogen las aportaciones de algunos de los científicos / profesionales más destacados a nivel nacional e internacional, tanto sobre la producción como sobre el análisis de oligosacáridos prebióticos, aspectos no tratados de forma simultánea en otros textos.

Este libro se ha organizado en tres partes, cuidadosamente integradas entre sí. En la primera parte, se trata la producción y bioactividad de oligosacáridos de origen animal, vegetal y microbiano, tanto presentes de forma natural u obtenidos mediante procedimientos de hidrólisis a partir de estas fuentes, como los prebióticos producidos por hidrólisis química o enzimática. En la segunda parte, se presenta una detallada y actualizada descripción, que incluye desde las metodologías clásicas, hasta las basadas en las más avanzadas técnicas espectroscópicas, cromatográficas, electroforéticas y espectrométricas, empleadas para el análisis cuali- y

cuantitativo o para la caracterización estructural de oligosacáridos bioactivos. Se incluye también una revisión de los métodos de fraccionamiento empleados como pretratamiento de la muestra. Finalmente, en la tercera parte se proporciona una visión general desde el punto de vista industrial de los aspectos prácticos relacionados con la incorporación de prebióticos en alimentos.

PART I. PRODUCTION AND BIOACTIVITY OF OLIGOSACCHARIDES

Part I.I. Naturally Occurring Oligosaccharides

1. Bioactivity of Human Milk Oligosaccharides
2. Production and Bioactivity of Bovine Milk Oligosaccharides
3. Production and Bioactivity of Oligosaccharides in Plant Foods
4. Production and Bioactivity of Oligosaccharides from Chicory Roots
5. Production and Bioactivity of Pectic Oligosaccharides from Fruit and Vegetable Biomass
6. Production and Bioactivity of Oligosaccharides from Chicory Roots
7. Production and Bioactivity of Pectic Oligosaccharides from Fruit and Vegetable Biomass
8. Production and Bioactivity of Oligosaccharides from Biomass Hemicelluloses
9. Starch Hydrolysis Products with Physiological Activity in Humans
10. Biosynthesis and Bioactivity of Exopolysaccharides Produced by Probiotic Bacteria

Part I.II. Non-Naturally Occurring Oligosaccharides

11. Production and Bioactivity of Oligosaccharides Derived from Lactose
12. Production and Bioactivity of Glucooligosaccharides and Glucosides Synthesized using Glucansucrases
13. Production and Bioactivity of Fructan-Type Oligosaccharides
14. Application of Immobilized Enzymes for the Synthesis of Bioactive Fructooligosaccharides

Part I.III. Assessment of Bioactivity

15. In Vitro Assessment of the Bioactivity of Food Oligosaccharides
16. In Vivo Assessment of the Bioactivity of Food Oligosaccharides

PART II. ANALYSIS

17. Fractionation of Food Bioactive Oligosaccharides
18. Classical Methods for Food Carbohydrate Analysis
19. Infrared Spectroscopic Analysis of Food Carbohydrates
20. Structural Analysis of Carbohydrates by Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy and Molecular Simulations: Application to Human Milk Oligosaccharides
21. Analysis of Food Bioactive Oligosaccharides by Thin-Layer Chromatography
22. Gas Chromatographic Analysis of Food Bioactive Oligosaccharides
23. Analysis of Bioactive Food-Sourced Oligosaccharides by High-Performance Liquid Chromatography
24. Capillary Electrophoresis and Related Techniques for the Analysis of Bioactive Oligosaccharides
25. Mass Spectrometric Analysis of Food Bioactive Oligosaccharides

PART III. PREBIOTICS IN FOOD FORMULATION

26. Nutritional and Technological Benefits of Inulin-Type Oligosaccharides
27. Industrial Applications of Galactooligosaccharides
28. Successful Product Launch: Combining Industrial Technologies with Adapted Health Ingredients

Epilogue:
Concluding Thoughts on Food Bioactive Oligosaccharides

Ana Cristina Soria
Instituto de Química Orgánica General (CSIC)

EMPRESAS colaboradoras

PROTECTORAS

• AGILENT TECHNOLOGIES SPAIN, S.L.
Ctra. A-6, km 18,200
28230 LAS ROZAS
(Madrid)

• BRUKER ESPAÑOLA, S.A.
Avda. Marie Curie, 5, Edificio Alfa - Pta. Baja
Parque Empresarial Rivas Futura
28529 RIVAS-VACIAMADRID
(Madrid)

• PERKIN ELMER ESPAÑA, S.L.
Avda. de los Encuartes, 19
28760 TRES CANTOS
(Madrid)

• TEKNOKROMA ANALÍTICA, S.A.
Camí de Can Calders, 14
08173 SANT CUGAT DEL VALLÉS
(Barcelona)

• THERMO FISHER SCIENTIFIC
Valportillo I, 22; 1ª Planta
Edificio Caoba
28108 ALCOBENDAS (Madrid)

• WATERS CROMATOGRAFÍA, S.A.
Ronda Can Fatjó, 7-A
Parc Tecnologic del Vallés
08290 CERDANYOLA DEL VALLES
(Barcelona)

ASOCIADAS

• AL AIR LIQUIDE ESPAÑA, S.A.
Paseo de la Castellana, 35
28046 MADRID

• GILSON INTERNATIONAL B.V.
Avda. de Castilla, 1 Edf. Best Point Of. 9-12
Polígono Empresarial San Fernando
28830 SAN FERNANDO DE HENARES (Madrid)

• INGENIERÍA ANALÍTICA, S.L.
Avenida Cerdanyola, 73
08172 SANT CUGAT DEL VALLÉS (Barcelona)

• IZASA, S.A.
Aragoneses, 13
Polígono Industrial Alcobendas
28108 ALCOBENDAS (Madrid)

• LECO INSTRUMENTOS, S.L.
Avda. de la Industria, 43
28760 TRES CANTOS (Madrid)

• MILLIPORE IBÉRICA, S.A.U.
Avda. de Burgos, 144
28050 MADRID

• SCHARLAB, S.L.
Gato Pérez, 33
Polígono Industrial Mas D'en Cisa
08181 SENTMENAT (Barcelona)

• SERVICIO Y MANTENIMIENTO DE TÉCNICAS ANALÍTICAS, S.A.L. (SYMTA, S.A.L.)
San Máximo, 31
28041 MADRID

• S.I.A. ENGINYERS, S.L.
Monturiol, 16, baixos
08018 BARCELONA

• SOCIEDAD ESPAÑOLA DE CARBUROS METÁLICOS
C/ Aragón, 300
08009 BARCELONA
Tlf.: 902 13 02 02
oferta@carburos.com

• SUGELABOR
Sicilia, 36
28038 MADRID

BRUKER

Bruker Chemical Analysis

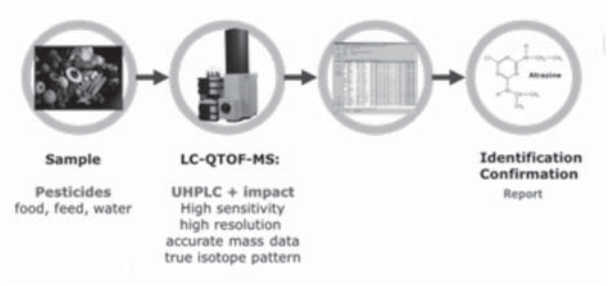
NUEVA GAMA DE SISTEMAS LCMS BRUKER CON TECNOLOGÍA QTOF

Bruker tiene una larga tradición de innovación y liderazgo en sistemas de Espectrometría de Masas Q-TOF, que desde hace tiempo se han convertido en referencia para las aplicaciones que requieren Ultra Alta resolución en Espectrometría de masas. Ahora Bruker da un paso más allá mejorando las prestaciones de dicha tecnología, avanzando en robustez y sensibilidad hacia una solución definitiva y de rutina para el análisis por LCMS.

La nueva gama ofrece tres modelos Compact, Impact II y Maxis II, con prestaciones en resolución y exactitud de masa crecientes en función de los problemas analíticos a abordar. El diseño único de esta familia de instrumentos permite encontrar el balance entre velocidad, resolución y sensibilidad ideal para prácticamente cualquier problema analítico que requiera una alta especificidad.

Por primera vez, la tecnología de Bruker nos permite obtener prestaciones de Ultra Alta resolución (>50.000 en Impact II) a velocidades de UHPLC, y con sensibilidades de fg en matrices reales. Todo ello va a suponer una revolución en la manera de afrontar los retos analíticos en un futuro próximo.

Basados en estos desarrollos tecnológicos, Bruker ha presentado a su vez las soluciones completas **ToxScreener** y **PesticideScreener** basadas ambas en el sistema UHR Q-TOF Impact II. Con ello se aporta una solución completa de rutina que permite integrar de una forma sencilla y efectiva la identificación de un gran número de compuestos en una sola inyección, aumentando el número de compuestos respecto a otras tecnologías, y ofreciendo una mayor seguridad en las identificaciones gracias a sus espectros MS y MS/MS de alta resolución obtenidos simultáneamente.



Asimismo se garantiza una excelente sensibilidad en matrices reales que permite de forma efectiva afrontar los niveles que nos exigen las normativas actuales en alimentación, medio ambiente y toxicología. Con estos desarrollos se dan los pasos para la definitiva consolidación de los sistemas UHR Q-TOF como la herramienta de mayor potencia analítica a la hora de identificar y cuantificar trazas en matrices complejas.

Como es habitual, las mejores prestaciones las podremos obtener siempre que podamos combinar tecnologías complementarias; por ello, los sistemas de detección por Triple Cuadrupolo (GCMS y LCMS) se integran cada vez más con los sistemas Q-TOF, proporcionando una excelente sinergia en la obtención de resultados.

Una ventaja significativa de los sistemas Q-TOF es la posibilidad de análisis retrospectivos. En muchos ámbitos, resulta muy atractivo poder volver a evaluar una muestra para comprobar si un determinado compuesto, no analizado previamente, estaba presente en la muestra original. Desde casos de toxicología forense hasta alertas alimentarias, es una característica nada despreciable. En los sistemas Q-TOF de Bruker se adquiere de forma simultánea el espectro MS y MS/MS, ambos en alta resolución y masa exacta, guardando dicha información con los datos adquiridos. Por ello, en cualquier momento se pueden reprocesar de forma sencilla y comprobar si un nuevo compuesto de interés estaba presente en una muestra, con total fiabilidad.

Todo ello complementado con las imprescindibles herramientas de software para identificación y "screening", cuantificación, metabolómica o proteómica en función de cual sea su campo de aplicación con rutas de trabajo intuitivas para operación en rutina.

Contacte con nosotros para descubrir la solución más apropiada para sus necesidades analíticas. Para obtener más información de Bruker, póngase en contacto con Bruker Daltonics en:

info-bcad-spain@bruker.com,
o en la web www.bruker.com

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

WATERS CUMPLE DIEZ AÑOS DE ACQUITY UPLC Y MIRA HACIA EL FUTURO CON EL DETECTOR ACQUITY QDA E IONKEY/MS EN PITTCON

ACQUITY QDa e ionkey/MS aportan a la LC/MS de convergencia la detección de masas (para la cromatografía) y las separaciones (para la espectrometría)

Waters® Corporation (NYSE: WAT) celebró el décimo aniversario del sistema ACQUITY® UltraPerformance LC® (UPLC®), una tecnología que generó un nuevo referente de rendimiento cromatográfico en el sector. Mirando hacia el futuro, Waters también presentó en su debut en Pittcon el nuevo sistema ionKey/MS™, un nuevo enfoque para obtener una sensibilidad, robustez y facilidad de uso excepcionales de la espectrometría de masas, y el ACQUITY QDa™, el primer detector de masas que aporta datos de alta calidad del espectro de masas a las separaciones cromatográficas.

"En 2004 cambiamos las reglas del juego. La cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) no satisfacía la necesidad del sector de analizar más muestras, más rápidamente y con mejores resultados. La aparición del sistema ACQUITY UPLC en 2004 transformó la forma de hacer ciencia tanto en la industria como en los laboratorios analíticos", explicó Art Caputo, Presidente de la división de Waters.

En los diez últimos años, el sistema ACQUITY UPLC ha tenido un profundo efecto sobre los laboratorios de todo el mundo, tanto desde el punto de vista científico como empresarial. La nueva capacidad del sistema ACQUITY UPLC para realizar separaciones con una tecnología de partículas de 1,7 micras, junto con su capacidad para funcionar a 15 000 psi, abrieron nuevas posibilidades de análisis. Los picos más estrechos y más concentrados del sistema ACQUITY UPLC aumentaron la eficacia de la ionización. La mayor resolución y robustez dio lugar a análisis reproducibles y de alta calidad en un tiempo considerablemente menor, reduciendo el tiempo de adquisición hasta 10 veces en comparación con la tecnología HPLC.

El sistema ACQUITY UPLC también ha demostrado ser una solución sostenible para los laboratorios, ya que ahorra energía, utiliza menos eluyente y produce menos residuos. De nuevo, en comparación con la tecnología HPLC, los laboratorios que utilizan el sistema ACQUITY UPLC ahorran aproximadamente 222 litros de eluyente al año. Durante un periodo de diez años, eso equivale a 5,5 millones de litros de eluyente, lo que representa un ahorro de más de 500 MILLONES DE DÓLARES ESTADOUNIDENSES para los clientes de Waters.

EL SISTEMA IONKEY/MS REDEFINE EL RENDIMIENTO DE LA MS

El nuevo sistema ionKey/MS™ es un nuevo enfoque para obtener sensibilidad, robustez y facilidad de uso excepcionales de la espectrometría de masas, para aplicaciones tan diversas como bioanálisis y estudios farmacocinéticos, hasta análisis medioambientales y de seguridad alimentaria. Concebido para utilizarse con el sistema ACQUITY UPLC M-Class de Waters y el espectrómetro de masas Xevo® TQ-S, el sistema ionKey/MS de Waters integra físicamente la separación por UPLC en el espectrómetro de masas, produciendo un aumento considerable en la sensibilidad que permite a los investigadores lograr una separación y detección de compuestos inigualable. Waters presentó el sistema ionKey/MS System en el congreso y exposición de Pittcon celebrado del 2 al 6 de marzo. El sistema ionKey/MS ya está disponible de inmediato para los investigadores de todo el mundo.

Además de la mayor sensibilidad, los investigadores elogian la naturaleza "plug and play" del sistema ionKey/MS. Ya no es necesario manipular los delicados conectores y columnas, ni preocuparse por la dispersión adicional de la columna, o la variabilidad y el ensanchamiento de picos inevitablemente asociados a esta manipulación. El dispositivo de separación de microfluidos iKey del sistema ionKey/MS está diseñado de forma que bastan unos segundos para que un investigador lo introduzca en la fuente del espectrómetro de masas y, con solo girar la llave, realice las conexiones eléctricas y del sistema de fluidos, y lo fije en su sitio.

El dispositivo de separación de microfluidos iKey del sistema ionKey/MS, con un tamaño similar al de un teléfono inteligente, contiene las conexiones del sistema de fluidos, los componentes electrónicos, la interfaz ESI, el horno de columnas, la tecnología de chip inteligente eCord™ y las partículas de 1,7 micras para UPLC dentro de un canal de 150 micras de diámetro interno para realizar cientos y cientos de separaciones UPLC de forma reproducible y fiable, sin degradación del rendimiento.

A esta escala cromatográfica, el ahorro de eluyente se aproxima al 90% y la facilidad de uso que el sistema ionKey/MS aporta al laboratorio cambia realmente las reglas del juego.

DETECCIÓN DE MASAS CON SOLO PULSAR UN BOTÓN, CON EL DETECTOR ACQUITY QDA

El detector ACQUITY QDa hace realidad una visión que comenzó hace 20 años en Waters al combinar las tecnologías de cromatografía y espectrometría de masas de forma que permita a cualquier investigador analítico acceder a los datos de los espectros de masas, independientemente de su experiencia previa con la espectrometría de masas. El detector ACQUITY QDa añade una dimensión totalmente nueva a las ciencias de separación y es el avance más significativo en la detección cromatográfica desde la aparición de los primeros detectores de fotodiodos hace décadas.

El detector ACQUITY QDa es un detector de masas pequeño, económico y fácil de usar, que aporta información de alta calidad de los espectros de masas a las separaciones cromatográficas. La información de los espectros de masas mejora notablemente la identificación de compuestos, algo muy importante para los laboratorios que se dedican al desarrollo de métodos, la obtención de perfiles de muestras, la síntesis química y la purificación. El detector ACQUITY QDa proporciona a los químicos analíticos la libertad de obtener por sí mismos la información de los espectros de masas de todas sus muestras (al igual que los datos de la matriz de fotodiodos) con solo pulsar un botón.

El detector ACQUITY QDa complementa la detección óptica (como la del detector PDA), confirmando la identidad de los compuestos con la información del espectro de masas. Además, el detector ACQUITY QDa amplía los límites de la detección de muestras en una separación cromatográfica al cuantificar los compuestos sin respuesta en UV o presentes en concentraciones no detectables ni cuantificables con la detección óptica. Al simplificar los flujos de trabajo del laboratorio, el detector aumenta el valor de cada análisis y aumenta la productividad al eliminar la necesidad de realizar análisis adicionales o recurrir a otras técnicas que consumen mucho tiempo con el fin de establecer de forma fiable las concentraciones y la identidad de los compuestos específicos de la muestra.

ACERCA DE WATERS CORPORATION
(www.waters.com)

Desde hace más de 50 años, Waters Corporation proporciona ventajas empresariales a las organizaciones que dependen del trabajo de laboratorio, mediante la oferta de productos innovadores prácticos y sostenibles que permiten lograr avances mundiales significativos en áreas tales como la asistencia sanitaria, la gestión medioambiental, la seguridad alimentaria y la calidad del agua.

Los descubrimientos tecnológicos y las soluciones para laboratorio de Waters, pioneros en el sector, conforman una cartera integrada de productos para la separación de compuestos, la gestión de la información del laboratorio, la espectrometría de masas y el análisis térmico, y ofrecen a los clientes una plataforma sólida para alcanzar el éxito. Waters impulsa la innovación científica y la excelencia operativa de sus clientes a escala mundial.

Waters, ACQUITY, UPLC, UltraPerformance LC, Advanced Polymer Chromatography, Xevo, ionKey/MS, Empower, Masslynx y eCord son marcas comerciales de Waters Corporation.

EL PRIMER GRUPO DE ARTÍCULOS GCxGC-MSTOF HA SIDO PUBLICADO EN CHEMPLUSCHEM.

El grupo ChemPlusChem de GCxGC-MS fue iniciado en el tercer Simposio Europeo GCxGC de LECO en Niza y ya está disponible on-line. Esta publicación muestra la efectividad del sistema Pegasus 4D GCxGC-TOFMS.

Cromatografía de Gases bidimensional: una nueva dimensión en la Ciencia Analítica

El editor invitado es el Prof. Uwe Meierhenrich quien dio una excelente conferencia de apertura en el tercer Simposio Europeo GCxGC.

Los artículos de fondo cubren un rango de tópicos, desde la cromatografía multidimensional "enantioselectiva", la evolución de los moduladores en las aplicaciones de cromatografía multidimensional, la seguridad alimentaria, los análisis de aromas y la química medioambiental.

La mejor noticia es que los manuscritos aún pueden ser presentados a este grupo dinámico. Si usted está interesado en publicar su trabajo con el sistema Pegasus 4D GCxGC-TOFMS en este grupo GCxGC-MS, pueden llamarnos al teléfono 0161 487 5900.

Para obtener más información, más contactos GCxGC y para unirte al mundo GCxGC de LECO, siga los siguientes links:

www.events-GCxGC.eu
www.chempluschem.org

NUEVO SOFTWARE CHROMATOF-HRT PARA EL SISTEMA GC-HRT DE ALTA RESOLUCIÓN.

- Identificación de conocidos/desconocidos mediante librería NIST y cálculo de fórmulas exactas.
- Creación y utilización de librerías espectrales de masas exactas.
- Utilización de escalas de defecto de masa por parte del usuario (ej. escalas de Kendrick y Halógenos).
- Búsqueda de desconocidos con ChemSpider.
- Herramientas para facilitar el análisis de alta resolución, incluyendo calculador de fórmulas y anotación espectral.
- Análisis semi-cuantitativo para el reporte de compuestos no calibrados.
- Reporte para medio ambiente completamente integrado.
- Tuning automatic.
- Control integrado del cromatógrafo de gases Agilent 7890GC.
- Interfase de usuario personalizable.
- Exportación de datos automática a formatos PDF, CSV, ANDI MS, mz/ML, o NETCDF.

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

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

Cuota anual: 30 €

- Señale la casilla ☐ correspondiente a la dirección en la que desea recibir la correspondencia.
- Puede efectuar el pago de la cuota del primer año mediante cheque bancario (adjuntándolo a esta solicitud) mediante cheque bancario (adjuntándolo a esta solicitud) o mediante ingreso/transferencia a la Cuenta Corriente del Banco BBVA: ES13 0182 4162 2702 0153 0059 (Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines). Debe figurar en el ingreso o transferencia: "ALTA SECYTA + nombre y primer apellido del Socio"
- ¿Autoriza a incluir su correo electrónico en la página Web de la SECyTA? SÍ NO (Tache lo que NO proceda)
- ¿Autoriza incluir sus datos de contacto en la sección "Nuevos Socios" del Boletín de la SECyTA? SÍ NO (Tache lo que NO proceda)

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

HOJA DE INSCRIPCIÓN

Apellidos ..... Nombre .....
DNI .....
☐ Domicilio particular:
Calle ..... Núm. .....
Municipio ..... Provincia.....
Código postal .....
Teléfono ..... Correo electrónico .....
☐ Industria u organización .....
.....
Calle ..... Núm. .....
Municipio ..... Provincia.....
Código postal .....
Teléfono ..... FAX ..... Correo electrónico .....

DATOS BANCARIOS

Banco/Caja de Ahorros .....
Sucursal .....
Dirección ..... Ciudad.....
D. .....
Con domicilio en .....
Y con IBAN ES_ _/_ _ _ _/_ _ _ _/_ _ _ _/_ _ _ _

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

En..... a.....de.....de 2015

Firma:

SECYTA

El Comité Editorial

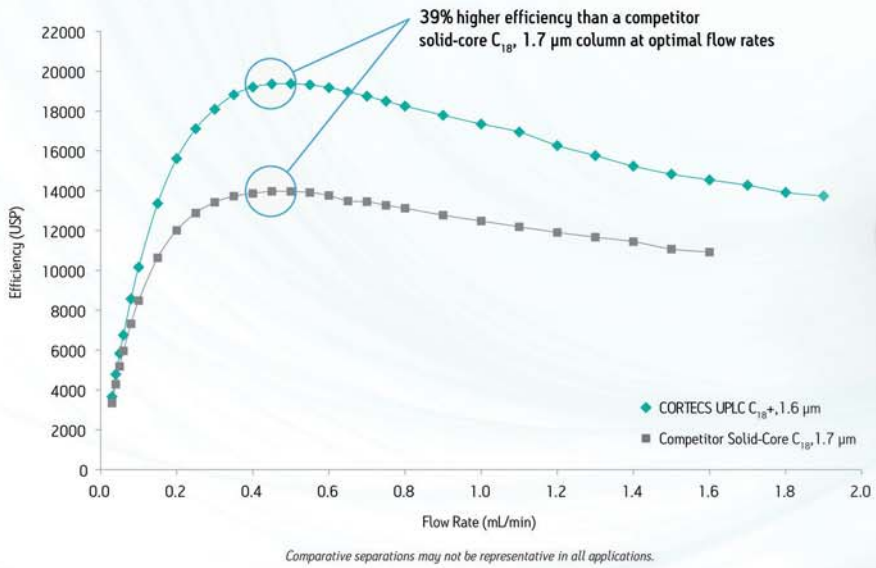
aprovecha para desearos un Feliz Año 2015
a todos los socios, lleno de venturas
y aventuras cromatográficas (y afines),
con una gran participación de todos
para que este Boletín sea más interesante,
ameno y tenga un poco de cada uno.

waters.com

EFICACIA INIGUALABLE.

Las columnas CORTECS™ 1.6 µm superan todas las expectativas. Para más información sobre la última adición a la familia de columnas UltraPerformance LC® de Waters, visite **waters.com/CORTECS**

CORTECS™ COLUMNS



Comparative separations may not be representative in all applications.

Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

Farmacéutica y ciencias de la vida | Alimentación | Medio Ambiente | Clínica | Análisis Químico

© 2013 Waters Corporation. Waters, CORTECS, UltraPerformance LC y The Science of What's Possible son marcas comerciales de Waters Corporation.