

CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

SECYTA

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE
CROMATOGRAFÍA
Y TÉCNICAS AFINES

BOLETÍN DE LA SECYTA
VOLUMEN 36 NÚM. 2 (2015)
36
WWW.SECYTA.ORG

Soluciones Bruker para el análisis químico



EVOQ GC/MSMS
Triple Cuadrupolo



EVOQ LC/MSMS
Triple Cuadrupolo



amaZon SL
LC/MS Trampa Iónica



compact QqTOF
Sistemas LCMS-QTOF

Sistemas innovadores en Cromatografía y Espectrometría de Masas para Análisis Químico

- Soluciones fiables, estables y fáciles de implementar para cualquier reto analítico.
- Integración de tecnologías innovadoras y software diseñados para una máxima productividad y prestaciones en cualquier aplicación analítica.
- Soluciones con GC-MSMS Triple Cuadrupolo, LC-MSMS Triple Cuadrupolo, LCMS-QTOF, LC-IT, FTMS y MALDI-TOF/TOF
- Excelente soporte de expertos comprometidos con sus objetivos analíticos.

Contacte con nosotros para mas detalles en
info-bcad-spain@bruker.com o www.bruker.com

CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

Madrid, Diciembre de 2015 Vol. 36, núm. 2

ISSN 1132-1369

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

ÍNDICE

54	EDITORIAL
	ARTÍCULOS
55	Aproximaciones analíticas <i>–in vitro</i> e <i>–in vivo</i> para evaluar la liberación del aroma en condiciones de consumo de vino. <i>A. Esteban-Fernández, C. Muñoz-González, M.V. Moreno-Arribas, M.A. Pozo-Bayón</i>
67	Herramientas cromatográficas en estudios de ecología microbiana. <i>Marta Lores, Jorge Domínguez, María Gómez-Brandón, Gerardo Álvarez-Rivera, María Llompert, Carmen García-Jares</i>
	NOTICIAS DE LA SECyTA
75	XV Reunión Científica de la SECyTA (44 ^a Reunión científica del CGTA)
77	XI Edición Premios “José Antonio García Domínguez”
84	15 ^a Asamblea General de la SECyTA
93	Junta de Gobierno de la SECyTA (2015)
94	Nuevos socios
95	Premios a socios
	INFORMACIONES
96	Congresos celebrados
99	Calendario de actividades
100	Nuevas tesis doctorales
	DE NUESTRAS EMPRESAS COLABORADORAS
107	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

Mario Fernández (mario@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)
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

Queridos socios de la SECyTA,

Durante estos últimos cuatro años, como todos sabéis, las líneas principales de actuación de nuestra Sociedad se han centrado en potenciar la política de becas para favorecer la asistencia a nuestras reuniones científicas y a los congresos internacionales relacionados con las técnicas de separación de un mayor número de jóvenes investigadores, miembros de la SECyTA, así como en aumentar la participación de los socios en nuestro Boletín y en mejorar la página web para hacer la comunicación y difusión de nuestras actividades científicas más dinámicas y activas. Por otro lado, se ha tratado de mejorar la calidad científica de nuestras reuniones anuales, invitando a ponentes de reconocido prestigio en el ámbito de las técnicas de separación, e impulsar la interrelación entre los diferentes grupos de investigación para promover el intercambio de conocimientos y futuras colaboraciones. Otro aspecto que se ha intentado potenciar ha sido la participación e implicación de las casas comerciales en nuestras reuniones. Por último, y no por ello menos importante, se ha mantenido y fortalecido la colaboración de la SECyTA con otras sociedades que comparten intereses comunes, como la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA), la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM), la Sociedad de Espectroscopia Aplicada (SEA) y la Sociedad Española de Proteómica (SEProt).

Como ya hemos comentado en varias ocasiones, la celebración de nuestras reuniones científicas anuales es una de las actividades más importantes de la Sociedad. Por ello, queremos celebrar con vosotros el éxito alcanzado en la XV Reunión Científica de la SECyTA (XLIV Reunión del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines), que se celebró de forma conjunta con la VII Reunión Nacional de la SEEM del 27 al 30 de octubre de 2015 en Castellón. Entre las razones de este éxito nos gustaría resaltar la buena sintonía existente entre ambas Sociedades, las interesantes conferencias impartidas por investigadores de reconocido prestigio internacional, la calidad de las comunicaciones presentadas, la numerosa participación de las casas comerciales y, por supuesto, a la magnífica organización llevada a cabo por los Drs. Juan Vicente Sancho y Joaquín Beltrán, de la Universidad Jaume I, responsables de la reunión, que nos han hecho disfrutar, en un clima y entorno maravillosos, tanto de un programa científico atractivo, competitivo y de calidad, como de un magnífico programa social que será recordado por todos nosotros durante mucho tiempo. Dentro del programa social, queremos destacar la cena de gala que se celebró en Torrelamina (Les Alqueries, Castellón) que, además de ser un entorno mágico (nunca mejor dicho), tuvo un atractivo especial al poder reunir a todos los presidentes de la SECyTA (y los dos últimos del GCTA) y buena parte de los presidentes de la SEEM. Podéis vernos a todos en la foto que nos hicimos para recordar este encuentro histórico.



Presidentes de la SECyTA (y antigua GCTA) y SEEM (de izquierda a derecha: Joan Grimalt Obrador, Fco. Javier Santos Vicente, María José González Carlos, Emilio Gelpí Monteys, María Teresa Galcerán Huguet, José Carlos Díez Masa y Encarna Moyano Morcillo).

Durante la Reunión tuvo lugar también la 15ª Asamblea General de la SECyTA, donde se celebraron las elecciones para la renovación parcial de la Junta de Gobierno de la Sociedad. En primer lugar queríamos dar las gracias a todos los socios por la confianza depositada en los miembros entrantes de la Junta y, en segundo lugar, agradecer tanto al Sr. Joan Solé Ribalta como a la Dra. María Luz Sanz Murias por su trabajo, compromiso y dedicación a la Sociedad durante los años que han formado parte de la Junta. Para finalizar, os animamos a participar el próximo año en la XVI Reunión Científica de la SECyTA (XLV Reunión desde el inicio del GCTA) que se celebrará en Sevilla del 2 al 4 de Noviembre de 2016. Por nuestra parte, la actual Junta trabajará junto con los organizadores de la Reunión en preparar un programa científico atractivo y de calidad, a la altura de vuestras expectativas.

María José González Carlos y Francisco Javier Santos Vicente
Presidentes saliente y entrante de la SECyTA

ARTÍCULOS

Aproximaciones analíticas *–in vitro* e *–in vivo* para evaluar la liberación del aroma en condiciones de consumo de vino.

Esteban-Fernández, A., Muñoz-González, C., Moreno-Arribas, M.V., Pozo-Bayón, M.A.*

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

Cl/Nicolás Cabrera, 9, 28049, Madrid. m.delpozo@csic.es; teléfono: 910017961

RESUMEN

Por su importancia en el aroma de los vinos, una gran mayoría de trabajos científicos se ha centrado primero en identificar los compuestos que integran la fracción volátil del vino empleando técnicas basadas en la cromatografía de gases (GC-FID, GC-MS), y en segundo lugar, en conocer su significado sensorial mediante el empleo de técnicas olfatoméricas (GC-O). Sin embargo, durante el consumo de alimentos, los compuestos del aroma se liberan en el interior de la cavidad oral y faríngea, pudiendo estar expuestos a diferentes transformaciones químicas y bioquímicas debidas a factores relacionados con la fisiología oral (enzimas de la saliva, temperatura, cambios de pH, adsorción a las mucosas orales, etc). Todos estos factores pueden modificar la composición del aroma original del vino y condicionar la cantidad y tipo de compuestos que finalmente interaccionarán con los órganos olfativos. Entender cómo influyen todos estos procesos requiere de una metodología analítica específicamente diseñada para monitorizar el aroma liberado en el propio individuo durante el consumo (métodos *in vivo*), o bien el desarrollo de dispositivos que mimeticen los procesos fisiológicos que tienen lugar durante la ingestión del vino (métodos *in vitro*). Todas estas aproximaciones analíticas y algunas de las aplicaciones en las que se han empleado en el caso del vino serán revisadas en este artículo.

1. INTRODUCCIÓN

El aroma del vino es uno de sus principales atributos de calidad y está entre los más decisivos a la hora de explicar las preferencias de los consumidores. Es por ello, que son muchos los trabajos científicos que se han encaminado a conocer e identificar la compleja fracción volátil del vino. Así que ya a finales de los años ochenta se habían identificado más de 800 compuestos volátiles (Maarse y Vischer, 1989). Desde el punto de vista químico, los compuestos del aroma se caracterizan por presentar bajos pesos moleculares (< 300 Da) y altas presiones de vapor (compuestos de alta volatilidad), lo que facilita su liberación de la matriz en la que se encuentran. Otras características de este tipo de compuestos son su gran

heterogeneidad en cuanto a estructura química (ésteres, aldehídos, cetonas, lactonas, terpenos, ácidos, compuestos azufrados), características físico-químicas (volatilidad, polaridad), y el amplio rango de concentraciones en las que pueden aparecer en los vinos (desde mg/L a ng/L). Muchos de los trabajos encaminados a la caracterización de este tipo de compuestos se han recogido en distintas revisiones bibliográficas (Rapp y Mandery, 1986; Polásková y col., 2008; Ebeler y Thorngate, 2009; Styger y col., 2011, Muñoz-González y col., 2011, Villamor y Ross, 2013).

Al tratarse de moléculas volátiles, la cromatografía de gases (GC) se ha convertido en la técnica de elección para la separación y posterior análisis de estos compuestos. En este sentido, el uso de la clásica cromatografía unidimensional se ha combinado en los últimos años con el empleo de la cromatografía bidimensional completa (GC×GC), que proporciona un mayor poder de resolución, mejorando la separación de muestras complejas, como es el caso del vino (Muñoz-González y col., 2011). La rapidez en la elución y la elevada resolución de los picos cromatográficos derivada del empleo de estas técnicas también ha requerido el desarrollo de detectores diferentes a los tradicionales (detector de ionización de llama (FID)), como los espectrómetros de masas (MS) de doble o triple cuadrupolo o con analizadores de tiempo de vuelo (ToF-MS), que permiten escanear de manera más rápida y sensible los analitos eluidos. Pero sin duda alguna, la evolución en las técnicas de preparación de muestra ha sido el gran hito que ha permitido profundizar en el conocimiento de la fracción volátil del vino. El empleo de técnicas como la extracción líquido-líquido (LLE, Liquid-Liquid Extraction) (Ferreira y col., 1993; Ferreira y col., 1998; Ortega-Heras y col., 2002; Andújar-Ortiz y col., 2009), la extracción en fase sólida (SPE, Solid Phase Extraction) (López y col., 2002; Hernanz y col., 2008), la microextracción en fase sólida (SPME, Solid Phase Microextraction) (Mestres y col., 1998; Pozo-Bayón y col., 2001; Ezquerro y col., 2003; Ezquerro y col., 2004; Perestrelo y col., 2009) o la extracción por sorción sobre barra agitadora (SBSE, Stir Bar Sorptive Extraction) (Coelho y col., 2009), entre otras, ha permitido el aislamiento y concentración de los compuestos volátiles que

se encuentran en el vino en pequeñas cantidades (incluso a niveles traza), permitiendo la identificación tanto de compuestos que contribuyen al aroma positivo del vino, como a defectos aromáticos (*off flavors*). Además, en los últimos años, muchas de estas técnicas han evolucionado y mejorado para intentar alcanzar una mayor exactitud, precisión, sensibilidad, rapidez y una reducción en el coste y en la cantidad de disolventes orgánicos empleados (Muñoz-González y col., 2011).

Sin embargo, como apuntó el científico francés Étievant a principios de los años noventa, el conocimiento analítico dirigido a descifrar el aroma del vino todavía no había sido capaz de interpretar el papel que ejercía cada componente individual en el mismo (Ferreira, 2002). Y es que a pesar de que en la actualidad se conoce la existencia de más de mil compuestos volátiles presentes en el vino (Polásková y col., 2008), sólo un número limitado de los mismos puede ser considerado olfativamente activo, lo que depende de su concentración y de su umbral de percepción (concentración mínima de un compuesto necesaria para ser detectados por el olfato humano).

En este sentido, las investigaciones desarrolladas en los últimos veinte años se han dirigido a estudiar el significado sensorial de las moléculas aromáticamente activas, es decir, aquéllas que desempeñan un papel relevante en la percepción final del aroma de un vino. Para ello, se han aplicado técnicas analíticas en combinación con el olfato humano como la cromatografía de gases con detección olfatométrica (GC-O) (**Figura 1**) y experimentos de omisión-reconstitución que han permitido comprobar que tan sólo unos pocos compuestos (entre 40 ó 50) tienen un verdadero impacto en el aroma del vino (Ferreira, 2002).

En el análisis por GC-O, los compuestos separados que eluyen de la columna cromatográfica son sensorialmente evaluados por una persona (*sniffer*), empleando la nariz como un detector mucho más sensible que cualquier detector analítico conocido. A partir del análisis por GC-O se puede obtener el denominado valor de actividad de aroma (OAV), que es la relación entre la concentración de un compuesto en el vino y su umbral de detección. Generalmente se considera que compuestos con $OAV > 1$ tienen impacto sensorial, tanto mayor cuanto mayor sea este valor. Para trabajar con esta técnica, se han propuesto diferentes metodologías, como la técnica AEDA (Aroma Extract Dilution Analysis) (Ullrich y Grosch, 1987), el método Charm® (Acree y col., 1984), la técnica OSME (Odor Specific Magnitude Estimation) (McDaniel y col., 1990) o, más recientemente, el método de Frecuencia de Detección (Pollien y col., 1997).

Sin embargo, a pesar de la indudable utilidad de este tipo de metodologías para jerarquizar la importancia odorífica de los compuestos volátiles que integran el aroma de un vino, la técnica GC-O presenta algunas limitaciones. La más importante se debe a que en GC-O los compuestos son primero separados y la calidad odorífica de cada uno de ellos es evaluada independientemente y no de forma integrada como ocurre cuando se percibe el aroma de un vino. De este modo, no se tienen en cuenta los fenómenos de interacción con los componentes no volátiles de la matriz vínica y de actividad, sinergismo o antagonismo con otros compuestos volátiles presentes en la mezcla (Ferreira, 2002; Pozo-Bayón y Reineccius, 2009; Lytra y col., 2013). La segunda limitación se refiere a la representatividad del extracto obtenido y que es posteriormente evaluado por GC-O. Recientemente d'Acamora y col. (2008) y Ferreira y col. (2009) han descrito las ventajas e inconvenientes del empleo de las diferentes técnicas preparativas para obtener un extracto representativo que refleje la composición aromática de partida.

El empleo de los ensayos de omisión-reconstitución puede solventar estos problemas. En este tipo de análisis, se realiza un primer screening mediante GC-O en el que se detectan los compuestos odoríficamente activos y, posteriormente, se prepara una solución sintética con todos ellos (experimento de reconstitución) (Grosch, 1993). A continuación, en los ensayos de omisión los distintos componentes de la mezcla se van eliminando uno a uno con el objetivo de medir y verificar cuál es el efecto sensorial que la eliminación del componente tiene sobre el aroma global. Pese a que este método ha funcionado muy bien en el caso de vinos con un fuerte aroma varietal (Guth, 1997; Ferreira y col., 2002; Escudero y col., 2004), es más problemático en ensayos dirigidos a interpretar el análisis de vinos más complejos (Ferreira, 2002).

De forma paralela al desarrollo de las técnicas analíticas, las técnicas de análisis sensorial han evolucionado para proporcionar datos sensibles, precisos y exactos sobre las características sensoriales de los vinos (Ebeler, 2005). Sin embargo, los avances en ambas técnicas están lejos de poder relacionar la composición global de un vino con sus propiedades sensoriales (Styger y col., 2011). Esto puede ser debido a la existencia de compuestos aromáticos aún por identificar en el vino debido a las limitaciones de las actuales técnicas analíticas, o también a otros fenómenos como la interacción de las moléculas del aroma con los componentes no volátiles del vino (matriz vínica), o a la transformación de los mismos durante el proceso de consumo debido a diferentes mecanismos físico-químicos y fisiológicos que tienen lugar

durante este proceso. Además, los compuestos del aroma pueden interactuar a nivel cognitivo, provocando fenómenos de aditividad, sinergismo o antagonismo (Atanasova y col., 2005; Roudnitzky y col., 2011), que influyen en la percepción sensorial del aroma del vino.

2. ANÁLISIS DEL AROMA LIBERADO DURANTE EL CONSUMO DE VINO

A pesar de la gran cantidad de trabajos encaminados a elucidar la composición química del vino, y el impacto que estos compuestos tienen en la percepción del olor de un vino, los mecanismos químicos y bioquímicos que tienen lugar durante el proceso de consumo, y que son los responsables de los compuestos finales del aroma que interactuarán con nuestros órganos olfativos, son mucho más desconocidos.

En este sentido, es importante señalar que la liberación del aroma durante el consumo de un alimento es un proceso secuencial, que puede comenzar antes incluso de la ingestión del mismo. En el caso del vino, comienza al abrir la botella o al servirlo en la copa, o simplemente al acercarnos y olerlo. En esta situación, las moléculas volátiles que se desprenden de la matriz vínica debido a su elevada presión de vapor son arrastradas por el flujo respiratorio y entran directamente a través de las fosas nasales desde donde se dirigen a los receptores olfativos situados en el epitelio olfativo. Dependiendo de su estereoquímica y concentración pueden interactuar con los receptores y desencadenar una cascada de señales neuronales que serán procesadas en el cerebro y que se traducen en la sensación percibida (Pozo-Bayón, 2009). A esta primera vía de paso de moléculas odorantes durante el consumo se la denomina ortonasal y este tipo de aroma se conoce generalmente como olor.

Sin embargo, el aroma que se libera durante el consumo de los alimentos, sigue una vía diferente hasta llegar a los receptores olfativos. Una vez introducido el alimento, y en el caso de alimentos líquidos, se produce la deglución del mismo. Durante la exhalación inmediatamente posterior a la deglución se crea un gradiente de concentración de aroma entre la capa que recubre la superficie de la faringe y el aire exhalado que pasa a su través. Ese aire exhalado entra dentro de la cavidad nasal y alcanza el epitelio olfativo donde los compuestos del aroma son percibidos vía retronasal, en un pulso de aroma conocido como *swallow breath* (Land, 1996; Buettner y Schieberle, 2000; Linforth y Taylor, 2000; Linforth y col., 2002; Linforth y Taylor, 2006). Este tipo de aroma que tiene lugar exclusivamente durante la ingestión de

alimentos se conoce como aroma retronasal (Buettner y col., 2008). Trabajos recientes han comprobado que la percepción del aroma vía ortonasal y retronasal puede ser diferente (Small y col., 2005). A pesar del hecho de que el aroma retronasal está directamente relacionado con la percepción del aroma y es un factor decisivo en las preferencias de los consumidores, apenas hay estudios científicos encaminados a comprender el proceso de liberación del aroma durante el consumo de vino y su relación con la composición del aroma retronasal. Una de las principales dificultades está en el hecho de encontrar las metodologías analíticas adecuadas que permitan monitorizar directamente el aroma liberado durante el consumo en la cavidad oral o nasal del individuo. Otras estrategias analíticas se basan en el diseño de dispositivos que simulen las condiciones dinámicas y fisiológicas del proceso de ingestión (bocas y gargantas artificiales). Algunas de estas aproximaciones analíticas y ejemplos de su aplicación se revisan a continuación.

2.1. Análisis del aroma retronasal empleando métodos *in vitro*

En general, las aproximaciones analíticas empleadas para simular la liberación de aroma durante el consumo de alimentos se han centrado en el empleo de diferentes dispositivos *in vitro*. Estas aproximaciones analíticas se basan principalmente en el empleo de técnicas de espacio de cabeza (HS), tanto en condiciones estáticas como dinámicas, que permiten cuantificar los compuestos que se liberan al espacio de cabeza desde el alimento. En muchos casos, se ha tratado de mimetizar en la medida de lo posible los procesos fisiológicos que acontecen durante el consumo de alimentos para simular el proceso de liberación del aroma que ocurre en una situación *in vivo*. Para ello, se han empleado distintos dispositivos (bocas artificiales, gargantas artificiales, etc.), más o menos sofisticados, que permiten monitorizar la liberación de los compuestos del aroma del alimento y que pueden ser posteriormente recogidos en diferentes trampas (polímeros adsorbentes, trampas criogénicas, etc.) para su posterior análisis por cromatografía de gases o directamente por espectrometría de masas (Piggott y Schaschke, 2001). Estos sistemas son muy útiles, ya que permiten entender mejor la contribución de cada factor que afecta al proceso de consumo de manera individual, lo que sería muy difícil de evaluar en estudios *in vivo*. Además, proporcionan un estricto control de las variables de estudio y permiten llevar a cabo un gran número de experimentos evitando las posibles diferencias inter-individuales. Sobre este tema, existen varias revisiones bibliográficas (Stephan y col., 2000; Piggott y Schaschke, 2001; Salles y col., 2011; Morell y col., 2014).

La aproximación más sencilla para monitorizar el aroma liberado de un alimento durante el consumo consiste en utilizar una técnica tradicional de espacio de cabeza en estático en la que se pueden prefiar unas condiciones de temperatura, normalmente cercanas a la temperatura corporal (37°C), y evaluar el efecto de un determinado parámetro orofisiológico. En este sentido, Mitropoulou y col. (2011) utilizaron SPME-GC/FID para evaluar el efecto de la saliva artificial en la liberación de aroma en vinos modelo dopados con diferentes concentraciones de polisacáridos y polifenoles. En este trabajo observaron que la presencia de estos macrocomponentes producía, en general, un aumento de la volatilidad de los compuestos más hidrofóbicos, mientras que los hidrofílicos se retenían más en la matriz.

En los últimos años se han desarrollado numerosos prototipos más complejos que el anteriormente descrito. Estos dispositivos, reciben el nombre de bocas artificiales y han ido perfeccionándose e incorporando nuevas variables, como la presencia de dientes e incluso la posibilidad de control informático para simular al máximo el proceso de masticación, que es un aspecto crítico en el caso de alimentos sólidos (van Ruth y col., 1994; van Ruth y Roozen, 2000; Deibler y col., 2001; Salles y col., 2007; Arvisenet y col., 2008; Poinot y col., 2009; Charles y col., 2013). Sin embargo, el empleo de estos dispositivos ha proporcionado en general mejores resultados cuando se ha aplicado al estudio de la liberación de aroma en alimentos líquidos, tales como aceite de girasol o zumo de naranja (Poinot y col., 2009), ya que en este caso no es necesario considerar el complejo proceso mecánico de la masticación. Algunos de estos ejemplos han sido las bocas artificiales diseñadas por Margomenou y col. (2000), Rabe y col. (2002), Rabe y col. (2004a), etc.

En el caso del vino, la bibliografía relacionada con el uso de bocas artificiales es prácticamente inexistente. Sin embargo, Genovese y col. (2009) investigaron el efecto de la saliva (humana y artificial) en la liberación de volátiles de un vino blanco y otro tinto empleando un dispositivo que simula una boca artificial conectado *off line* con HS-SPME-GC/FID y HS-SPME-GC/MS empleando condiciones dinámicas. Más recientemente, Muñoz-González y col. (2014) realizaron un estudio más sistemático en el que emplearon HS-SPME-GC/MS en condiciones estáticas y dinámicas para evaluar el impacto de la adición de la saliva en vinos con distinta composición. Las condiciones dinámicas se basaron en el empleo de un dispositivo (biorreactor de saliva), con control de temperatura y agitación, y que permitía la incorporación de un flujo de gas (N₂) para simular las condiciones dinámicas de la boca, así como la incorporación de saliva. La moni-

torización de los volátiles liberados del vino se realizó empleando una fibra de SPME (DVB/CAR/PDMS) a distintos tiempos: t=0, en el que la temperatura de la mezcla de saliva/vino era inferior a la temperatura fisiológica (25°C), y que podría corresponder con la fase oral, y t=10 minutos, momento en el que la temperatura era similar a la temperatura fisiológica oral (36°C), y que correspondería a una fase post-oral. Tanto la aplicación de las condiciones estáticas como dinámicas reveló una influencia significativa tanto del tipo de vino como de la adición de saliva. Sin embargo, las condiciones estáticas fueron más sensibles para detectar diferencias en la cantidad de aroma liberado asociadas a variaciones en la composición del vino.

Por otro lado, en los últimos años se ha comprobado que, sobre todo en alimentos líquidos, la deglución juega un importante papel en la percepción del aroma (De Roos y Wolswinkel, 1994). Como se comentó anteriormente, tras la deglución de un alimento se forma una fina capa de líquido (o material sólido) que recubre la faringe y se ha observado que la mayor parte del aroma depositado en esa capa se libera casi instantáneamente durante la primera exhalación tras el consumo (*swallow breath*) (Buettner y col., 2001; Weel y col., 2003). Por ello, para monitorizar el aroma liberado durante el consumo se han desarrollado también sistemas basados en gargantas artificiales, priorizando los procesos que tienen lugar tras la deglución, y que pueden ser adecuados para mimetizar la liberación de aroma durante el consumo de alimentos líquidos (Weel y col., 2004; King y col., 2006; Pozo-Bayón y col., 2009).

El empleo de técnicas como la espectrometría de masas con ionización química a presión atmosférica (APCI-MS) (Weel y col., 2004; King y col., 2006; Pozo-Bayón y col., 2010) o la espectrometría de masas con transferencia de protón (PTR-MS) (Buettner y col., 2008; Pozo-Bayón y col., 2009), acopladas a bocas o gargantas artificiales permite monitorizar de manera continua la liberación del aroma en tiempo real (Yven y col., 2010) y, por tanto, captar la dimensión temporal de la liberación del aroma de los alimentos, proporcionando una mejor correlación entre la sensación percibida durante el consumo y la concentración y el tipo de molécula responsable. Recientemente, y por primera vez en el caso del vino, Muñoz-González y col. (2015) desarrollaron un sistema de boca artificial acoplado *on line* a PTR-ToF-MS, que permitió obtener el perfil de liberación de aroma en tiempo real de vinos aromatizados con los mismos compuestos volátiles y a la misma concentración, pero que presentaban diferencias en la composición no volátil. El análisis de los parámetros de las curvas de liberación: *I*_{max}

(máxima intensidad) y *AUC* (área bajo la curva), que están relacionados con el valor máximo de intensidad y el aroma total liberado, respectivamente, reveló un importante efecto de la matriz no volátil del vino y, principalmente, del contenido en polifenoles totales, sobre el perfil de aroma liberado.

Todos los dispositivos descritos anteriormente son una herramienta de gran utilidad a la hora de estudiar los efectos de parámetros orofisiológicos de manera independiente, pero no siempre permiten controlar los complejos procesos que se producen en condiciones reales de consumo y, por lo tanto, muchas veces resulta complicado establecer una relación directa entre estos datos y los proporcionados mediante análisis sensorial (Piggott y Schaschke, 2001; Taylor, 2002; Rabe y col., 2004b). Para simular de manera conjunta todos los procesos que ocurren durante el consumo de alimentos, sería deseable que el dispositivo integrara numerosas funciones fisiológicas (dentición, deglución, peristalsis, salivación, etc) y, en consecuencia, que fueran mucho más complejos que los descritos hasta la fecha.

2.2 Análisis del aroma retronasal empleando métodos *in vivo*

En la actualidad, la posibilidad de integrar todos los procesos fisiológicos que ocurren durante el consumo de un alimento sólo es posible mediante el análisis *in vivo*. La liberación del aroma durante el consumo se puede medir muestreando los compuestos volátiles exhalados directamente en la boca o la nariz del consumidor con el objetivo de proporcionar una mejor representación de los compuestos volátiles que alcanzarán el epitelio olfativo (Piggott y Schaschke, 2001). Este tipo de metodología ha recibido diferentes nombres: análisis del aroma *in vivo*, *nosespace o breath by breath* (Taylor y Linforth, 2000; Yeretian y col., 2000; Taylor y Linforth, 2003).

Un importante punto a tener en cuenta durante el empleo de esta metodología es la gran variación entre individuos debida a diferencias en flujos respiratorios, patrones de deglución, composición de la saliva, etc. (Buettner y col., 2001; Taylor 2002; Normand y col., 2004; Mestres y col., 2006; Muñoz-González y col., 2014). Este problema, sin embargo, puede reducirse empleando un amplio número de individuos, usando datos normalizados y siguiendo estrictos procedimientos de consumo (Piggott y Schaschke, 2001; Normand y col., 2004; Aprea y col., 2007; Salles y col., 2011). De hecho, en un reciente estudio llevado a cabo por Aprea y col. (2007), el uso de un protocolo de consumo permitió reducir la variabilidad interindividual en un 52%.

La monitorización de liberación de aroma durante el consumo puede realizarse en tiempo real o de manera *off line*. Respecto a esta segunda aproximación, se han descrito varios sistemas de atrapamiento del aroma, con una característica común: los volátiles se atrapan durante el consumo gracias al uso de trampas poliméricas que posteriormente pueden desorberse y analizarse por cromatografía de gases (Linforth y Taylor, 1993; Delahunty y col., 1996). Estos dispositivos permiten un enriquecimiento de la muestra que normalmente está muy diluida, una separación previa ya que pueden acoplarse a GC-O y GC-MS y, por tanto, una identificación más exacta. Además, pueden proporcionar una mayor selectividad por el uso de diferentes materiales poliméricos y son relativamente fáciles de emplearse en cualquier laboratorio.

Existen varios tipos de sistemas de atrapamiento en función de si los volátiles exhalados se monitorizan a nivel de la cavidad nasal u oral. El primer grupo de sistemas de atrapamiento son los que muestrean los volátiles presentes en la cavidad oral y se basan en la premisa de que los volátiles monitorizados a este nivel se encuentran en una concentración similar a la que alcanzan en los receptores olfativos (O'Riordan y Delahunty, 2001). Roozen y Legger-Huysman (1994) desarrollaron un sistema mediante el cual los compuestos volátiles liberados en la boca tras el consumo eran atrapados en una trampa de Tenax empleando vacío y posteriormente fueron analizados por GC. Este sistema se conoce como *muestreo de la respiración oral* (OBS, Oral Breath Sampling), y fue posteriormente modificado y adaptado para estudiar la liberación del aroma de café en diferentes bebidas con distinto contenido en grasa y proteínas (Denker y col., 2006).

El segundo grupo de sistemas de atrapamiento de aroma es el basado en el muestreo en la cavidad nasal (análisis *in-nose*) (Ingham y col., 1995). Estas técnicas analíticas también se basan en la premisa de que la concentración de aroma que se alcanza en las fosas nasales es similar a la que llega a los receptores olfativos (Taylor, 1996; Denker y col., 2006; Linforth y col., 2002), aunque recientemente se considera la posibilidad de la existencia de un gradiente intranasal que produzca variaciones temporales en la concentración dependiendo del tipo de compuesto (Frasnelli y col., 2005).

Los primeros análisis *in-nose* se basaron en el atrapamiento de los volátiles liberados a través de las fosas nasales en una trampa polimérica o criogénica a diferentes tiempos después del consumo de alimentos (Piggott y Schaschke, 2001). En este sentido, Buettner y Schieberle (2000) introdujeron el concepto de la *medida del odorante*

exhalado (EXOM, Exhaled Odorant Measurement) para obtener datos cuantitativos y precisos de liberación de aroma de alimentos. Esta técnica combinaba las ventajas del atrapamiento en un material adsorbente como el Tenax junto con la aplicación del ensayo de dilución de isótopos estables (SIDA, Stable Isotope Dilution Assay), permitiendo una cuantificación muy exacta de los volátiles de la respiración. Además, ofrecía la posibilidad de concentrar las moléculas odorantes antes del análisis, por lo tanto, fue una aproximación útil para estudiar la liberación de aroma en las concentraciones tan bajas en las que se encuentran muchos de los odorantes en condiciones de consumo reales (*in vivo*), que no podrían detectarse mediante el empleo de técnicas de análisis en tiempo real. Esta metodología ha sido recientemente utilizada por Lasekan y col. (2009) para evaluar la liberación de aroma durante el consumo de una bebida fermentada conocida como *vino de palma*. En el caso del vino, el trabajo recientemente desarrollado por Muñoz-González y col. (2014) representa la primera aproximación analítica para la determinación de la cantidad total de aroma liberado empleando condiciones *in vivo*. En este trabajo se empleó un dispositivo denominado RATD (Retronasal Aroma Trapping Device), que fue previamente optimizado y validado (Muñoz-González y col., 2014a), y que permitía atrapar el aliento de respiración (exhalación) de los panelistas tras el consumo de 100 mL de vino empleando trampas de Tenax. Todo el sistema estaba conectado a una bomba de vacío que favorecía la extracción del aroma desde las fosas nasales al polímero (**Figura 2**). Posteriormente, el aroma retenido en la trampa era eluído con una mezcla de disolventes orgánicos y, tras la concentración, los volátiles fueron analizados empleando CIS (Cooled Injection System)-GC/MS.

La percepción prolongada del aroma retronasal, a menudo llamada persistencia del aroma, puede ser debida a la liberación de los volátiles adsorbidos por las mucosas oral o faríngea después del consumo de alimentos. La mucosa puede actuar como una especie de depósito aromático, responsable de la persistencia de la percepción de un determinado aroma que se produce después del consumo (Buettner, 2004). Esta capacidad está determinada por la posibilidad de algunos odorantes de adsorberse a la mucosa oral y liberarse con diferentes cinéticas de desorción según sus características físico-químicas. La adsorción de las moléculas odorantes a la mucosa oral puede evaluarse de diferentes maneras. Una de ellas consiste en calcular la diferencia entre la cantidad de aroma presente en una solución antes y después de ser expectorada tras ser mantenida en la boca durante cierto tiempo (SOOM, Spit Off Odorant Measurement). Esta aproximación fue empleada por Buettner y col. (2002), quienes unos años más tarde desarrollaron otro sistema que permitía moni-

torizar la liberación de aroma en la cavidad bucal: BOS (Buccal Odour Screening System). Esta técnica se basa en la extracción intraoral a tiempos definidos de compuestos odorantes que se han quedado retenidos en la cavidad bucal gracias al empleo de una barrita agitadora o Twister (SBSE). Seguidamente, los volátiles son desorbidos en la unidad de desorción térmica y analizados por GC-O o GC-MS (Buettner, 2004; Buettner y Welle, 2004; Buettner y Mestres, 2005). Otro desarrollo analítico que recientemente se ha comprobado permite la monitorización del aroma liberado de la cavidad oral es el empleo de la técnica SPME intra-oral. Mediante esta aproximación, Esteban-Fernández y col. (2014) evaluaron el impacto de la composición de la matriz no volátil del vino en la capacidad de adsorción a la mucosa oral de compuestos del aroma del vino.

No obstante, todas estas técnicas se basan en el atrapamiento de la cantidad total de compuestos volátiles liberados durante el consumo y no toman en consideración la dimensión dinámica de la liberación del aroma que se produce durante el consumo y que podría correlacionar mejor con la evolución en la percepción del aroma durante el consumo de un alimento.

El análisis del aroma en tiempo real es una aproximación metodológica muy importante para establecer la relación entre liberación y percepción de aroma durante el tiempo que dura el consumo del alimento (Linthorpe y Taylor, 1993; Avison, 2013). Como se ha comentado anteriormente, el análisis del aroma en tiempo real es posible gracias al empleo de técnicas espectrométricas, tales como APCI-MS (Taylor, 1996), PTR-MS (Lindinger y col., 1998; Yereztian y col., 2000) y Selected Ion Flow Tube Mass Spectrometry (SIFT-MS) (Spaniel y Smith, 1999). Entre ellas, las más ampliamente utilizadas son APCI-MS y PTR-MS. La primera fue desarrollada para el análisis de aromas y fragancias, mientras que el análisis de contaminantes atmosféricos o la monitorización de volátiles de respiración con fines médicos fue el objetivo principal de la segunda. Sin embargo, en la actualidad ambas técnicas se utilizan indistintamente en estudios de liberación del aroma durante el consumo.

Estas técnicas se basan en la monitorización de los compuestos del aroma en las fosas nasales mediante el empleo de un espectrómetro de masas y proporcionan un perfil de masas del aroma liberado a tiempo real durante el período que dura el consumo del alimento. Además, la aplicación de esta metodología permite comprobar los compuestos que se liberan después del consumo y que pueden estar relacionados con la persistencia del aroma. La mayor parte de los estudios de liberación del aroma *in*

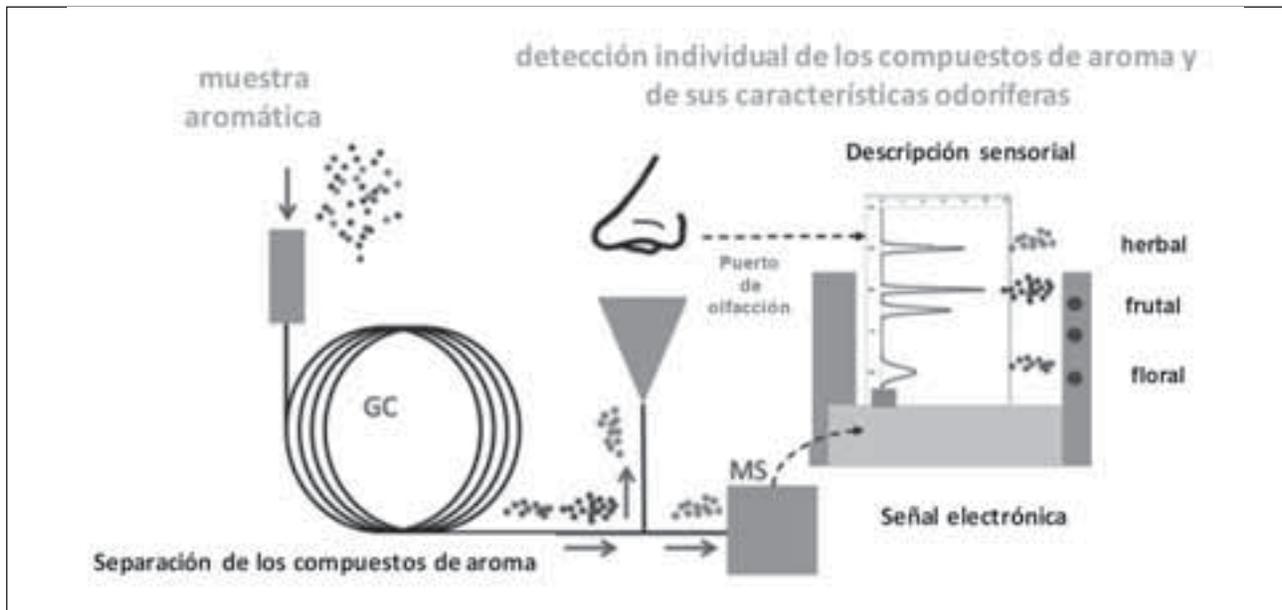


Figura 1. Esquema del análisis mediante cromatografía de gases-olfatosimetría (GC-O).
Adaptada de <http://www.foodprocessingtechnology.com/contractors/training/flavologic/flavologic2.html>).

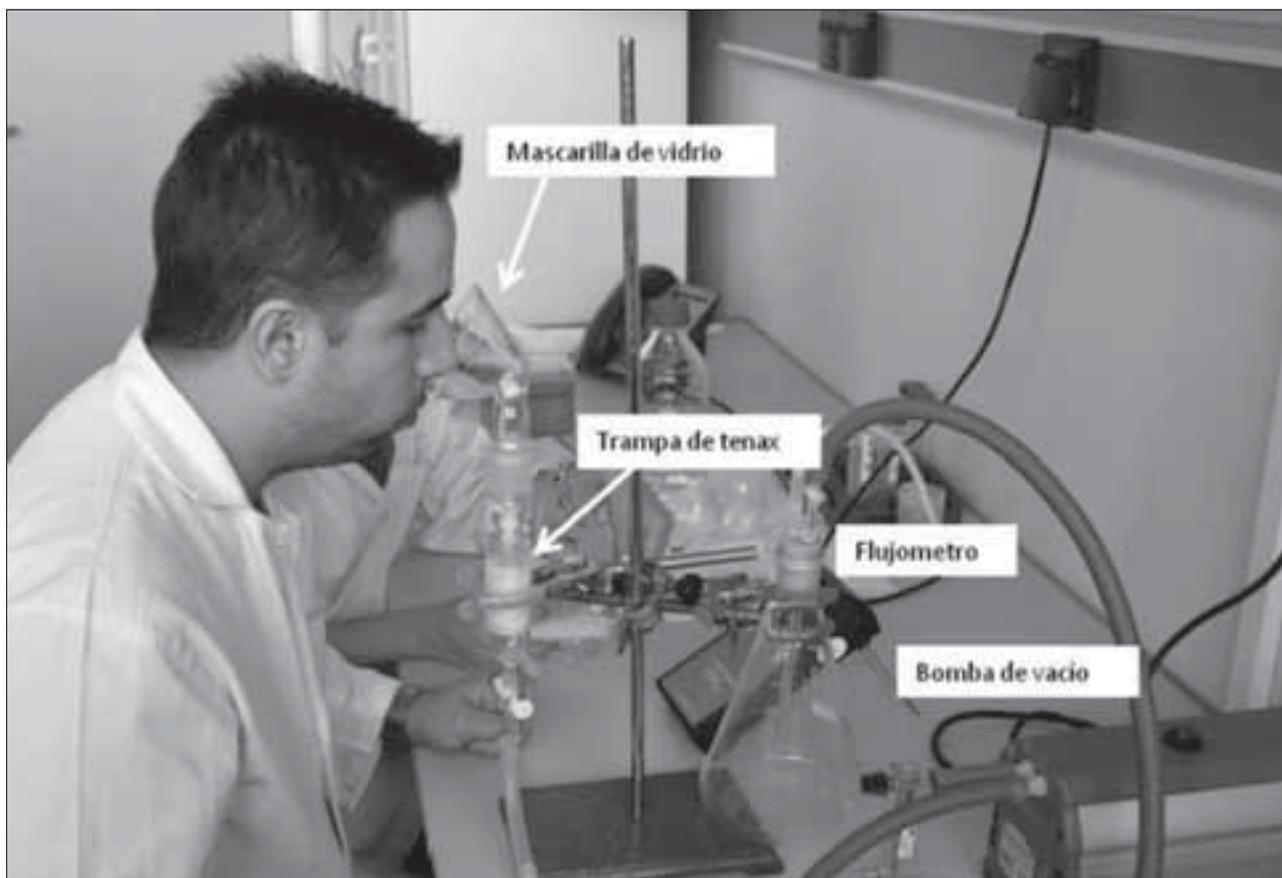


Figura 2. Ejemplo de análisis del aroma total liberado durante el consumo de vinos empleando el sistema de atrapamiento de aroma retronasal (RATD) desarrollado en el Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CIAL, CSIC).

vivo se han llevado a cabo con productos sólidos y semi-sólidos como geles, productos lácteos, gomas de mascar (Brauss y col., 1998; Brauss y col., 1999; Linforth y col., 1999; Boelrijk y col., 2006). Sin embargo, sólo unos pocos estudios se han centrado en alimentos líquidos (Linforth y Taylor, 2000; Doyen y col., 2001; Linforth y col., 2002; Lasekan y col., 2009).

En el sistema de APCI-MS, una interfaz dirige una fracción del aire exhalado a la fuente de ionización del espectrómetro de masas mediante efecto Venturi. Allí, los volátiles son ionizados e introducidos en la región de alto vacío del espectrómetro de masas. Esta técnica se ha utilizado en un gran número de aplicaciones (Linforth y Taylor., 2000; Ruijschop y col., 2009; Linforth y col., 2010; Blee y col., 2011; Clark y col., 2011, etc.) y actualmente se comercializa con el nombre de MS Nose™ (Micromass-Manchester, Reino Unido) (Figura 3).

Las principales características de la técnica de PTR-MS han sido revisadas en artículos previos (Lindinger y col., 1998; Hansel y col., 1998) y, como en el caso de la APCI-MS, se trata de una técnica muy sensible. En PTR-MS, los compuestos volátiles son introducidos en la fuente de ionización gracias a las condiciones de vacío del espectrómetro de masas. Los iones son extraídos y transferidos a la cabina de reacción (*drift tube*) donde tiene lugar la ionización química a temperatura y presión controlada, por lo que todos los componentes de la mezcla se ionizan en el mismo grado.

En ambas técnicas el ion primario usado para la ionización química es habitualmente el hidronio (H_3O^+) que se produce en la fuente de ionización. La ionización ocurre cuando se transfiere la carga del agua (H_3O^+) al analito. Los volátiles son detectados de acuerdo a su relación m/z como iones correspondientes al ion molecular protonado (MH^+). En APCI-MS esto sucede a presión atmosférica, mientras que en PTR-MS esto ocurre a bajo vacío. Recientemente, en un estudio de comparación de las dos técnicas se ha comprobado que la APCI-MS presenta un límite de detección 10 veces menor y un rango lineal diez veces mayor que la PTR-MS (Avison, 2013). Sin embargo, los resultados de otro estudio de comparación de ambas técnicas no mostraron diferencias entre ellas (Deleris y col., 2013). Además, la PTR se ha combinado con otros tipos de analizadores diferentes al cuadrupolo, tales como la trampa de iones (Warneke y col., 2004; Warneke y col., 2005) o el analizador de tiempo de vuelo (Blake y col., 2004; Soukoulis y col., 2013; Tsevdou y col., 2013), lo que proporciona mayor sensibilidad y resolución (Heenan y col., 2012), permitiendo realizar los estudios de liberación del aroma en alimentos tan complejos como el vino.

Ambas técnicas proporcionan perfiles de liberación tiempo-intensidad de los iones de interés bien resueltos, de tal manera que se pueden calcular algunos parámetros como la cantidad total de odorantes detectados en un cierto tiempo, y que es equivalente al *AUC*, la *I_{max}*, y el tiempo necesario para alcanzar la máxima intensidad (*T_{max}*) (Figura 4).

Las ventajas más importantes del empleo de espectrómetros de masas para monitorizar el aroma en tiempo real están normalmente relacionadas con tiempos cortos de respuesta (generalmente 200 ms o menos) y la relativamente alta sensibilidad de la técnica. Además, el hecho de ser técnicas de ionización suaves, minimiza la fragmentación de los compuestos lo que implica una interpretación más sencilla de los resultados. Desafortunadamente, estas metodologías también presentan limitaciones, como son las relativas a la discriminación de algunos compuestos en el detector del equipo, la presencia de interferencias procedentes de la matriz del alimento, la dificultad en la identificación de compuestos que presentan el mismo peso molecular (compuestos isobáricos), etc. Por otra parte, la falta de una separación previa a la detección del analito implica la superposición del espectro de todos los compuestos que llegan al mismo tiempo al detector (*mass fingerprint*). Esto hace que, dependiendo de la complejidad de la muestra analizada, la identificación del compuesto (y cuantificación) puede a veces ser difícil o imposible (Spitaler y col., 2007). Además, el análisis de los datos y la interpretación de los resultados requiere mucho tiempo y en ocasiones es problemática (Gierczynski y col., 2011). Otra de las desventajas que se han indicado recientemente es su dificultad para el estudio de aromas complejos, presentes en la mayoría de los alimentos, debido precisamente a la falta de selectividad y a la dificultad de interpretación de los espectros (Poinot y col., 2013).

A pesar del número creciente de aplicaciones de las técnicas basadas en PTR-MS y APCI-MS para monitorizar la liberación del aroma en tiempo real, estas técnicas apenas se han empleado en el caso del vino. Esto puede ser debido a algunos problemas relacionados con la composición de la matriz vínica, en concreto con el impacto del etanol en el proceso de ionización (Spitaler y col., 2007). Se ha comprobado que cuando el etanol está presente en una concentración superior a 100 ppm, los iones primarios H_3O^+ pueden reaccionar con él para formar monómeros, dímeros, trímeros, aductos con moléculas de agua, iones fragmentados e incluso agrupamientos de etanol, que podrían reaccionar con los compuestos volátiles (Spitaler y col., 2007), de tal manera que sería imposible poder comparar muestras con diferente contenido en etanol.

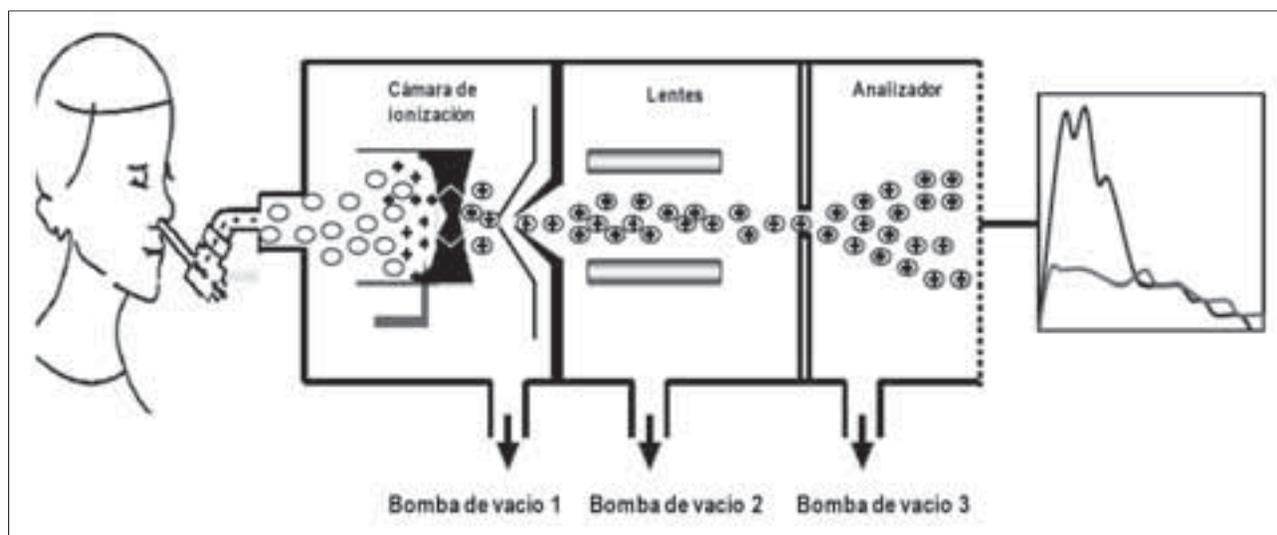


Figura 3. Diagrama esquemático del análisis mediante MS Nose™. Adaptada de Hollowood 2002, PhD.

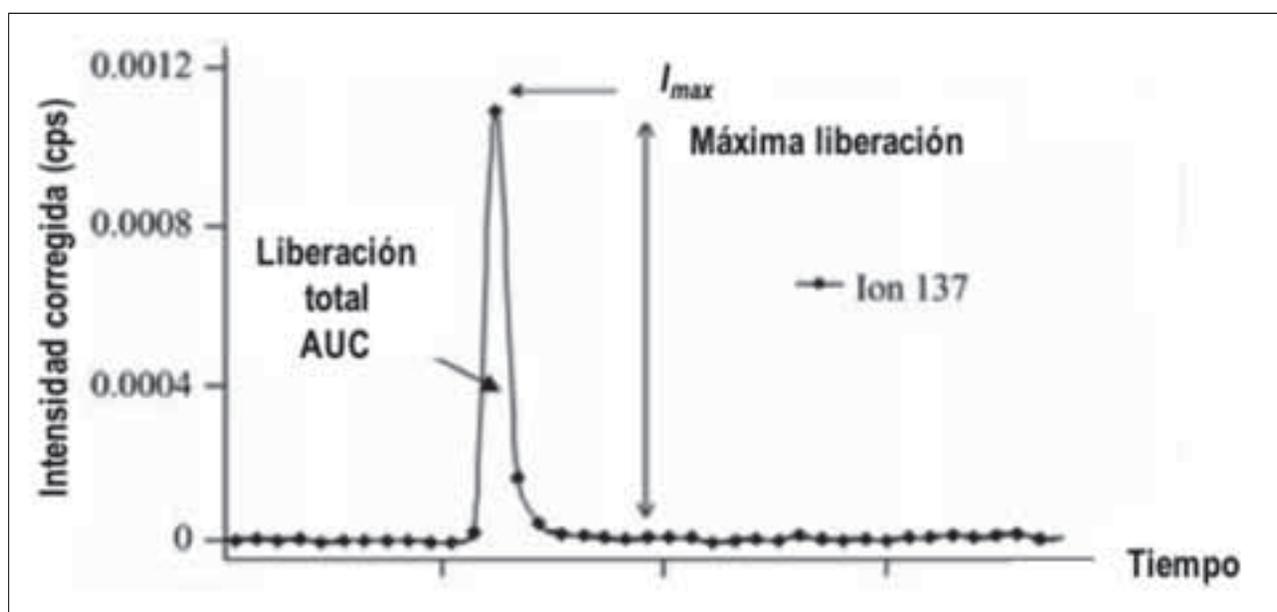


Figura 4. Curva de liberación de limoneno en agua aromatizada obtenida mediante el empleo de una garganta artificial acoplada a un equipo de PTR-MS. Adaptada de Pozo-Bayón y col., 2009.

Se han propuesto dos posibles soluciones para evitar estos problemas. Una consiste en diluir el espacio de cabeza de la muestra con un flujo de nitrógeno saturado en etanol, desplazando los iones H_3O^+ por etanol protonado (Boscaini y col., 2004; Aznar y col., 2004). Otra solución propuesta en la literatura consiste en mantener los iones H_3O^+ como iones reactivos de ionización química, pero aplicando una dilución 40x al espacio de cabeza del vino con N_2 puro (Spitaler y col., 2007). Más recientemente, Fiches y col. (2013) han propuesto un sencillo método basado en el control del proceso de ionización en el que la variación de la energía media de colisión en el *drift tube* durante el análisis de disoluciones hidroalcohólicas (en un rango comprendido entre el 10-40 % (v/v)) permite realizar un análisis cuantitativo para caracterizar brandies en función de su grado de envejecimiento (Fiches y col., 2014). Sin embargo, todas estas aplicaciones han sido con fines dirigidos a la clasificación de muestras de distintas características y no para evaluación de liberación del aroma en tiempo real. Tan sólo en el trabajo de Deleris y col. (2011) se investigó la influencia de la deglución en la liberación del aroma durante el consumo de vodka empleando la técnica de PTR-MS.

3. CONCLUSIONES

En los últimos años hay cada vez más evidencias científicas de que la fisiología oral influye en la composición del aroma retronasal y es importante incluirla entre los factores más decisivos que intervienen a la hora de explicar la percepción del aroma de un alimento. Aunque en el caso del vino este tipo de investigación es muy incipiente, el desarrollo de nuevas aproximaciones analíticas *in vivo* e *in vitro* está permitiendo identificar los factores composicionales del vino y orofisiológicos que afectan a la liberación del aroma durante el consumo. En los próximos años la aplicación combinada de técnicas analíticas (GC-MS, GC-O), metodologías para la monitorización de aroma en tiempo real (PTR-MS, APCI-MS) y técnicas fisioanalíticas como la videofluoroscopia o el empleo de la resonancia magnética de imágenes (fMRI) de las áreas del cerebro que se activan con distintos estímulos aromáticos, así como el análisis sensorial, permitirán comprender mejor cómo se produce el proceso de la percepción del aroma durante la ingesta de vino y los principales factores implicados.

4. BIBLIOGRAFÍA

- Acree, T. E., Barnard, J., & Cunningham, D. G. (1984). *Food Chem.*, 14 (4), 273-286.
- Andújar-Ortiz, I., Moreno-Arribas, M. V., Martín-Álvarez, P. J., & Pozo-Bayón, M. A. (2009). *J. Chromatogr. A*, 1216 (43), 7351-7357.
- Aprea, E., Biasioli, F., Mark, T. D., & Gasperi, F. (2007). *Int. J. Mass Spectrom.*, 262 (1-2), 114-121.
- Arvisenet, G., Billy, L., Poinot, P., Vigneau, E., Bertrand, D., & Prost, C. (2008). *J. Agric. Food Chem.*, 56 (9), 3245-3253.
- Atanasova, B., Thomas-Danguin, T., Chabanet, C., Langlois, D., Nicklaus, S., & Etievant, P. (2005). *Chem. Senses*, 30 (3), 209-217.
- Avison, S. J. (2013). *J. Agr. Food Chem.*, 61 (9), 2070-2076.
- Aznar, M., Tsachaki, M., Linforth, R., Ferreira, V., & Taylor, A. (2004). *Int. J. Mass Spectrom.* 239 (1), 17-25.
- Blake, R. S., Whyte, C., Hughes, C. O., Ellis, A. M., & Monks, P. S. (2004). *Anal. Chem.*, 76 (13), 3841-3845.
- Blee, N., Linforth, R., Yang, N., Brown, K., & Taylor, A. (2011). *Flavour Frag. J.*, 26 (3), 186-191.
- Boelrijk A. E., Smith G., & Weel K. G. (2006). En: A. Voilley & P. Etievant, *Flavour in Food* (pág. 260-279). New York: CRC Press.
- Boscaini, E., Mikoviny, T., Wisthaler, A., von Hartungen, E., & Mark, T. D. (2004). *Int. J. Mass Spectrom.*, 239 (2-3), 215-219.
- Brauss, M. S., Linforth, R. S. T., & Taylor, A. J. (1998). *J. Agric. Food Chem.*, 46 (6), 2287-2292.
- Brauss, M. S., Linforth, R. S. T., Cayeux, I., Harvey, B., & Taylor, A. J. (1999). *J. Agric. Food Chem.*, 47 (5), 2055-2059.
- Buettner, A., & Schieberle, P. (2000). *Lebensm-Wiss. Technol.*, 33 (8), 553-559.
- Buettner, A., Beer, A., Hannig, C., & Settles, M. (2001). *Chem. Senses*, 26 (9), 1211-1219.
- Buettner, A., Beer, A., Hannig, C., Settles, M., & Schieberle, P. (2002). *Food Qual. Prefer.*, 13 (7-8), 497-504.
- Buettner, A. (2004). *J. Agric. Food Chem.*, 52 (8), 2339-2346.
- Buettner, A., & Welle, F. (2004). *Flavour Frag. J.*, 19 (6), 505-514.
- Buettner, A., & Mestres, M. (2005). *J. Agric. Food Chem.*, 53 (5), 1661-1669.
- Buettner, A., Otto, S., Beerc, A., Mestres, M., Schieberle, P., & Hummel, T. (2008). *Food Chem.*, 108 (4), 1234-1246.
- Charles, M., Poinot, P., Texier, F., Arvisenet, G., Vigneau, E., Mehinagic, E., & Prost, C. (2013) *Food Qual. Prefer.*, 28 (1), 264-270.
- Clark, R., Linforth, R., Bealin-Kelly, F., & Hort, J. (2011). *J. I. Brewing*, 117 (1), 74-81.
- Coelho, E., Coimbra, M. A., Nogueira, J. M. F., & Rocha, S. M. (2009). *Anal. Chim. Acta*, 635 (2), 214-221.
- d'Acampora Zellner, B., Dugo, P., Dugo, G., & Mondello, L. (2008). *J. Chromatogr. A* 1186 (1-2), 123-143.

- De Roos, K. B., & Wolswinkel, K. (1994). En: H. Maarse & D. G. van der Heij, *Trends in Flavour Research* (pág. 15-32). Amsterdam: Elsevier Science.
- Deibler, K., Lavin, E., Linforth, R., Taylor, A. J., & Acree, T. E. (2001). *J. Agric. Food Chem.*, 49 (3), 1388–1393.
- Delahunty, C., Piggott, J., Conner, J., & Paterson, A. (1996). *J. Sci. Food Agric.*, 71 (3), 273–281.
- Deleris, I., Saint-Eve, A., Guo, Y., Lieben, P., Cypriani, M.-L., Jacquet, N., Brunerie, P., & Souchon, I. (2011). *Chem. Senses*, 36 (8), 701-713.
- Deleris, I., Saint-Eve, A., Semon, E., Guillemin, H., Guichard, E., Souchon, I., & Le Quere, J.-L. (2013). *J. Mass Spectrom.*, 48 (5), 594-607.
- Denker, M., Parat-Wilhelms, M., Drichelt, G., Paucke, J., Luger, A., Borchering, K., Hoffmann, W., & Steinhart, H. (2006). *Food Chem.*, 98 (2), 201-208.
- Doyen, K., Carey, M., Linforth, R. S. T., Marin, M., & Taylor, A. J. (2001). *J. Agric. Food Chem.*, 49 (2), 804-810.
- Ebeler, S. E. (2005) En: K. Deibler, *Handbook of Flavor Characterization*. New York: CRC Press.
- Ebeler, S. E., & Thorngate, J. H. (2009). *J. Agric. Food Chem.*, 57 (18), 8098-8108.
- Escudero, A., Gogorza, B., Melus, M. A., Ortin, N., Cacho, J., & Ferreira, V. (2004). *J. Agric. Food Chem.*, 52 (11), 3516-3524.
- Esteban-Fernández, A., Rocha-Albadillo, N., Muñoz-González, C., Moreno-Arribas, M.V., Pozo-Bayón, M. A. En: *Jornadas de Análisis Instrumental 2014*, Barcelona, Spain (póster AALP-16).
- Ezquerro, O., Pons, B., & Tena, M. T. (2003). *J. Chromatogr. A*, 999 (1-2), 155-164.
- Ezquerro, O., Ortiz, G., Pons, B., & Tena, M. T. (2004). *J. Chromatogr. A*, 1035 (1), 17-22.
- Ferreira, V., Rapp, A., Cacho, J. F., Hastrich, H., & Yavas, I. (1993). *J. Agr. Food Chem.*, 41 (9), 1413-1420.
- Ferreira, V., López, R., Escudero, A., & Cacho, J. F. (1998). *J. Chromatogr. A*, 806 (2), 349-354.
- Ferreira, V. (2002). *ACE Revista de Enología* (24).
- Ferreira, V., Ortin, N., Escudero, A., Lopez, R., & Cacho, J. (2002). *J. Agric. Food Chem.*, 50 (14), 4048-4054.
- Ferreira, V., Juan, F. S., Escudero, A., Culleré, L., Fernández-Zurbano, P., Saenz-Navajas, M. P., & Cacho, J. (2009). *J. Agric. Food Chem.*, 57 (16), 7490-7498.
- Fiches, G., Deleris, I., Saint-Eve, A., Brunerie, P., & Souchon, I. (2014). *Int. J. Mass Spectrom.*, 360, 15-23.
- Frasnelli, J., Van Ruth, S., Kriukova, I., & Hummel, T. (2005). *Chem. Senses*, 30 (7), 575-582.
- Genovese, A., Piombino, P., Gambuti, A., & Moio, L. (2009). *Food Chem.*, 114 (1), 100-107.
- Gierczynski, I., Guichard, E., & Laboure, H. (2011). *Flavour Frag. J.*, 26 (3), 141-152.
- Grosch, W. (1993). *Trends Food Sci. Tech.*, 4 (3), 68-73.
- Guth, H. (1997). *J. Agric. Food Chem.*, 45 (8), 3022-3026.
- Hansel, A., Jordan, A., Warneke, C., Holzinger, R., & Lindinger, W. (1998). *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 12 (13), 871-875.
- Heenan, S., Soukoulis, C., Silcock, P., Fabris, A., Aprea, E., Cappellin, L., Maerk, T. D., Gasperi, F., & Biasioli, F. (2012). *Food Chem.*, 131 (2), 477-484.
- Hernanz, D., Gallo, V., Recamales, A. F., Melendez-Martinez, A. J., & Heredia, F. J. (2008). *Talanta*, 76 (4), 929-935.
- Hollowood, T. A. (2002) .PhD thesis, University of Nottingham.
- Ingham, K. E., Linforth, R. S. T., & Taylor, A. J. (1995). *Food Chem.*, 54 (3), 283-288.
- King, B. M., Arents, P., Bouter, N., Duineveld, C. A. A., Meyners, M., Schroff, S. I., & Soekhai, S. T. (2006). *J. Agric. Food Chem.*, 54 (7), 2671-2677.
- Land, D. G. (1996). En: R. J. McGorin & J. V. Leland, *Flavor-Food Interactions*, vol. 633 (pág. 2-11). Washington: American Chemical Society.
- Lasekan, O., Buettner, A., & Christlbauer, M. (2009). *AJFAND*, 9 (2), 793-813.
- Lindinger, W., Hansel, A., & Jordan, A. (1998). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes*, 173 (3), 191-241.
- Linforth, R., & Taylor, A. (1993). *Food Chem.*, 48 (2) 115-120.
- Linforth, R. S. T., Baek, I., & Taylor, A. J. (1999). *Food Chem.*, 65 (1), 77-83.
- Linforth, R., & Taylor, A. J. (2000). *J. Agric. Food Chem.*, 48(11), 5419-5423.
- Linforth, R., Martin, F., Carey, M., Davidson, J., & Taylor, A. J. (2002). *J. Agric. Food Chem.*, 50 (5), 1111-1117.
- Linforth, R., & Taylor, A. (2006). En: A. Voilley & P. Etievant, *Flavour in Food* (pág. 287-307). New York: CRC Press.
- Linforth, R., Cabannes, M., Hewson, L., Yang, N., & Taylor, A. (2010). *J. Agric. Food Chem.*, 58 (11), 6905-6911.
- López, R., Aznar, M., Cacho, J., & Ferreira, V. (2002). *J. Chromatogr. A*, 966 (1-2), 167-177.
- Lytra, G., Tempere, S., Le Floch, A., de Revel, G., & Barbe, J.-C. (2013). *J. Agric. Food Chem.*, 61 (36), 8504-8513.
- Maarse, H., & Visscher, C. A. (1989). *The Netherlands, Zeist Grafische Industry Kreon*.
- Margomenou, L., Birkmyre, L., Piggott, J. R., & Paterson, A. (2000). *J. I. Brewing*, 106 (2), 101-105.
- McDaniel, M., Miranda-López, R., Walson, B., Micheals, N., & Libbey, L. (1990). En: G. Charalambous, *Flavors and Off-Flavors* (pág. 23-36). Amsterdam: Elsevier.
- Mestres, M., Busto, O., & Guasch, J. (1998). *J. Chromatogr. A*, 808 (1-2), 211-218.
- Mestres, M., Kieffer, R., & Buettner, A. (2006). *J. Agric. Food Chem.*, 54 (5), 1814-1821.
- Mitropoulou, A., Hatzidimitriou, E., & Paraskevopoulou, A. (2011). *Food Res. Int.*, 44 (5), 1561-1570.
- Morell, P., Hernando, I., & Fiszman, S. M. (2014). *Trends Food Sci. Tech.*, 35 (1), 18-31.
- Muñoz-González, C., Rodríguez-Bencomo, J. J., Moreno-Arribas, M. V., & Pozo-Bayón, M. A. (2011). *Anal. Bioanal. Chem.*, 401 (5), 1497-1512.

- Muñoz-González, C., Martín-Alvarez, P., Moreno-Arribas, M. V., Pozo-Bayón, M. A. (2014). *J. Agric. Food Chem.*, 62 (1), 66-73.
- Muñoz-González, C., Rodríguez-Bencomo, J. J., Moreno-Arribas, M. V., Pozo-Bayón, M. A. (2014a). *Food Sci. Nutr.*, 2(4), 361–370.
- Muñoz-González, C., Semon, E., Martín-Alvarez, P., Guichard, E., Feron, G., Moreno-Arribas, M. V., Pozo-Bayón, M. A. *Aust. J. Grape Wine R.*, 21 (3), 367-375.
- Normand, V., Avison, S., & Parker, A. (2004). *Chem. Senses*, 29(3), 235-245.
- O’Riordan, P. J., & Delahunty, C. M. (2001). *Flavour Frag. J.*, 16 (6), 425-434.
- Ortega-Heras, M., González-SanJosé, M. L., & Beltrán, S. (2002). *Anal. Chim. Acta*, 458 (1), 85-93.
- Perestrelo, R., Nogueira, J. M. F., & Cámara, J. S. (2009). *Talanta*, 80 (2), 622-630.
- Piggott, J., & Schaschke, C. (2001). *Biomol. Eng.*, 17 (4-5), 129-136.
- Poinot, P., Arvisenet, G., Grua-Priol, J., Fillonneau, C., & Prost, C. (2009). *Food Res. Int.*, 42 (5-6), 717-726.
- Poinot, P., Arvisenet, G., Ledauphin, J., Gaillard, J.-L., & Prost, C. (2013). *Food Qual. Prefer.*, 28(1), 304-316.
- Polásková, P., Herszage, J., & Ebeler, S. E. (2008). *Chem. Soc. Rev.*, 37 (12), 2478-2489.
- Pollien, P., Ott, A., Montigon, F., Baumgartner, M., Muñoz-Box, R., & Chaintreau, A. (1997). *J. Agric. Food Chem.*, 45 (7), 2630-2637.
- Pozo-Bayón, M. A., Pueyo, E., Martín-Álvarez, P. J., & Polo, M. C. (2001). *J. Chromatogr. A*, 922 (1-2), 267-275.
- Pozo-Bayón, M. A. (2009). Estrategias en el estudio del aroma de los alimentos y su relación con la percepción del aroma (http://www.percepnet.com/ciencia/aroma_alimentos_consumo_cien1009.htm).
- Pozo-Bayón, M. A., & Reineccius, G. (2009). En: M. V. Moreno-Arribas & P. Carmen, *Wine Chemistry and Biochemistry* (pág. 417-435). New York: Springer Science + Business Media.
- Pozo-Bayón, M., Santos, M., Martín-Álvarez, P., & Reineccius, G. (2009). *Flavour Frag. J.*, 24 (5), 226–233.
- Pozo-Bayón, M. A., Pimenta, P., Pilch, S., Masters, J., Martín-Álvarez, P., & Reineccius, G. (2010). *J. Agric. Food Chem.*, 58 (8), 5034–5041.
- Rabe, S., Krings, U., Banavara, D. S., & Berger, R. G. (2002). *J. Agric. Food Chem.*, 50 (22), 6440-6447.
- Rabe S, Linforth R, Krings U, Taylor A, Berger R. (2004a). *Chem. Senses*, 29 (2), 163-173.
- Rabe, S., Krings, U., & Berger, R. (2004b). *Chem. Senses*, 29 (2), 153-162.
- Rapp, A., & Mandery, H. (1986). *Experientia*, 42 (8), 873-884.
- Roozen, J., & Legger-Huysman, A. (1995). En: M. Rothe & H. Kruse (pág. 627-632). Eusenach: Potsdam-Rehbrücke: Eigenverlag Deutsches Institut für Ernährungsforschung.
- Roudnitzky, N., Bult, J. H. F., de Wijk, R. A., Reden, J., Schuster, B., & Hummel, T. (2011). *Behav. Brain Res.*, 216 (1), 109-115.
- Ruijschop, R. M. A. J., Burgering, M. J. M., Jacobs, M. A., & Boelrijk, A. E. M. (2009). *Chem. Senses*, 34 (5), 395-403.
- Salles, C., Tarrega, A., Mielle, P., Maratray, J., Gorria, P., Liaboeuf, J., & Liodenot, J. J. (2007). *J. Food Eng.*, 82 (2), 189-198.
- Salles, C., Chagnon, M.-C., Feron, G., Guichard, E., Laboure, H., Morzel, M., Semon, E., Tarrega, A., & Yven, C. (2011). *Crit Rev Food Sci Nutr.*, 51 (1), 67-90.
- Small D.M., Gerber J., Mak Y.E., Hummel T. (2005). *Neuron*, 47(4) pp. 593–605.
- Soukoulis, C., Cappellin, L., Aprea, E., Costa, F., Viola, R., Maerk, T. D., Gasperi, F., & Biasioli, F. (2013). *Food Bioprocess Tech.*, 6 (10), 2831-2843.
- Spanel, P., & Smith, D. (1999). *RCM*, 13 (7), 585-596.
- Spitaler, R., Araghypour, N., Mikoviny, T., Wisthaler, A., Via, J. D., & Märk, T. D. (2007). *Int. J. Mass Spectrom.*, 266 (1-3), 1-7.
- Stephan, A., Bucking, M., & Steinhart, H. (2000). *Food Res. Int.*, 33 (3-4), 199-209.
- Styger, G., Prior, B., & Bauer, F. F. (2011). *J. Ind. Microbiol. Biot.*, 38 (9), 1145-1159.
- Taylor, A. J. (1996). *Compr. Rev. Food Sci. F.*, 36 (8), 765-784.
- Taylor, A. J., & Linforth, R. S. T. (2000). En: D. D. Roberts & A. J. Taylor, *Flavour release*, vol. 763 (pág. 8-21). Washington: ACS Publications.
- Taylor, A. (2002). *Compr. Rev. Food Sci. F.*, 1(2), 45-57.
- Taylor, A. J., & Linforth, R. S. T. (2003). *Int. J. Mass Spectrom.*, 223-224, 179-191.
- Tsevdou, M., Soukoulis, C., Cappellin, L., Gasperi, F., Taoukis, P. S., & Biasioli, F. (2013). *Food Chem.*, 138 (4), 2159-2167.
- Ullrich, F., & Grosch, W. (1987). *Z. Lebensm. Unters. For.*, 184 (4), 277-282.
- Van Ruth, S., Roozen, J., & Cozijnsen, J. (1994). En: H. Maarse & D. Van Der Heij, *Trends in Flavor Research* (pág. 59-64). Amsterdam: Elsevier Science.
- Van Ruth, S., & Roozen, J. (2000). *Food Chem.*, 713 (3), 339-345.
- Villamor, R. R., & Ross, C. F. (2013). *Annu. Rev. Food Sci. Technol.*, 4, 1-20.
- Warneke, C., Rosen, S., Lovejoy, E., De Gouw, J., & Fall, R. (2004). *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 18 (1), 133-134.
- Warneke, C., De Gouw, J., Lovejoy, E., Murphy, P., Kuster, W., & Fall, R. (2005). *J. Am. Soc. Mass. Spectrom.*, 16 (8), 1316-1324.
- Weel, K. G. C., Boelrijk, A. E. M., Burger, J. J., Claassen, N. E., Gruppen, H., Voragen, A. G. J., & Smit, G. (2003). *J. Agric. Food Chem.*, 51 (16), 4746-4752.
- Weel, K. G. C., Boelrijk, A. E. M., Burger, J. J., Verschueren, M., Gruppen, H., Voragen, A. G. J., & Smit, G. (2004). *J. Agric. Food Chem.*, 52 (21), 6564-6571.
- Yeretzyan, C., Jordan, A., Brevard, H., & Lindinger, W. (2000). En: *Flavour release*, vol. 763 (pág. 58-72). Washington D.C.: ACS Publications.
- Yven, C., Guessasma, S., Chaunier, L., Della Valle, G., & Salles, C. (2010). *J. Food Eng.*, 101 (1), 85-91.

ARTÍCULOS

Herramientas cromatográficas en estudios de ecología microbiana.

Marta Lores⁽¹⁾,*, Jorge Domínguez⁽²⁾, María Gómez-Brandón⁽³⁾, Gerardo Álvarez-Rivera⁽¹⁾, María Llompart⁽¹⁾, Carmen García-Jares⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratorio de Investigación y Desarrollo de Soluciones Analíticas (LIDSA)

Dpto. Química Analítica. Facultad de Química. Campus VIDA-USC

Santiago de Compostela. E-157821

⁽²⁾ Departamento de Ecología e Biología Animal, Universidade de Vigo, E-36310 Vigo, Spain

⁽³⁾ Institute of Microbiology, Technikerstrasse 25d, University of Innsbruck, 6020

8 Innsbruck, Austria

*marta.lores@usc.es, Tel: +34-881-814-386, Fax: +34-981-595-012

RESUMEN

La Química Analítica puede considerarse una disciplina “solucionadora de problemas”. Este enfoque implica retos constantes a los que sólo se puede hacer frente con una base sólida en técnicas de extracción y de separación. En esta línea, los químicos analíticos, y particularmente los cromatografistas, han establecido todo tipo de colaboraciones con ecólogos, microbiólogos y biólogos de muchos otros ámbitos. De hecho, las técnicas cromatográficas han resultado ser herramientas bioanalíticas extremadamente útiles para resolver problemas en todos esos campos; principalmente en sus combinaciones con la espectrometría de masas, pero también utilizando combinaciones instrumentales más convencionales. En este artículo, mostraremos una selección de ejemplos para ilustrar cómo se han utilizado diferentes estrategias cromatográficas para esclarecer cuestiones ecológicas no resueltas, fundamentalmente en el ámbito de la ecología química microbiana. Dichas estrategias analíticas implican la identificación y determinación de biomarcadores microbianos, ya sean constituyentes estructurales (ejemplificados por los ácidos grasos de los fosfolípidos de las membranas de bacterias y hongos) o metabolitos (ilustrados por el seguimiento de MVOCs –compuestos orgánicos volátiles de origen microbiano- generados por los microorganismos durante sus procesos metabólicos). Cada sección comienza con una breve introducción de la aplicación correspondiente, seguida de la discusión de diferentes casos de estudio, incluyendo una recapitulación de la metodología analítica propuesta.

INTRODUCCIÓN

El desarrollo de métodos de separación e identificación en el contexto de la Química Analítica puede contribuir a encontrar respuestas a cuestiones importantes en

estudios ecológicos. La idea principal subyacente es la relación entre la cromatografía y la ecología química. La ecología química es un área de investigación interdisciplinar entre la química y la biología que abarca el aislamiento, la identificación, la síntesis y la biosíntesis de semioquímicos (compuestos químicos emitidos por un organismo que provocan una respuesta fisiológica o de comportamiento en otro organismo de la misma o diferente especie) (Mori, 2013; Pickett, 2006). Las feromonas son semioquímicos que difunden información entre individuos de una misma especie, mientras que los aleloquímicos son semioquímicos utilizados para la comunicación entre individuos de diferentes especies (Pickett, 2006). Así, la atracción y la comunicación entre seres vivos implican frecuentemente la detección de “infoquímicos” específicos y, consecuentemente, las estrategias de supervivencia eficaces de las especies se diseñan sobre la base de la ecología química.

La cromatografía de gases (GC) es esencial para la investigación en ecología química debido a su excelente poder de separación, sensibilidad y detección universal, especialmente cuando se combina con detectores de espectrometría de masas. Jones y Oldham (1999) revisaron el análisis de feromonas por cromatografía de gases; desde entonces, las aplicaciones cromatográficas en el campo de la ecología química se han extendido en la misma medida en que han evolucionado las técnicas instrumentales de separación y detección.

Se han identificado varios miles de feromonas y compuestos relacionados, a menudo en cantidades del orden de nanogramos o incluso inferiores utilizando detectores específicos como el detector de electroantenograma (GC-EAD) (Millar, 2012) que sirve para determinar respuestas electrofisiológicas. Los compuestos, volátiles y no-volátiles, liberados por bacterias se pueden identificar y cuantificar mediante GC-MS, LC-MS, pirólisis-GC-MS y

MALDI-TOF. El uso de la cromatografía líquida (LC) en ecología química es todavía más importante, ya que la disponibilidad de instrumentación acoplada a detectores convencionales -normalmente UV-Vis y fluorescencia- está mucho más extendida en laboratorios no estrictamente químicoanalíticos. Es más, hay sistemas modelo, críticos en el desarrollo de teorías en ecología química y coevolución, como las cardenolidas –toxinas esteroideas- que se monitorizan de modo habitual por HPLC (Agrawal et al., 2012). Por último, la configuración LC-MS-MS se ha aplicado al análisis de algunas moléculas-señal (Quorum-Sensing Signaling Molecules – QSSMs), moléculas difusibles de bajo peso molecular que actúan como un medio de comunicación intercelular para coordinar comportamientos bacterianos, tales como la producción de metabolitos secundarios, el desarrollo de biopelículas, la motilidad y la virulencia (Ortori et al., 2011; Williams et al., 2007).

En definitiva, el mayor interés de este planteamiento es poner de relieve la conexión entre los químicos analíticos y los (micro)biólogos para resolver problemas en ámbitos científicos antes considerados independientes, pero cuya frontera es cada vez más tenue. En este trabajo, se muestran algunos ejemplos de este tipo de cooperación entre cromatografistas e investigadores de los campos de la biología animal y la microbiología, que trabajan conjuntamente en líneas de investigación integradas.

ECOLOGÍA QUÍMICA MICROBIANA

Las bacterias representan el dominio más diverso de la vida en la Tierra, con miembros que ocupan casi todos los nichos naturales. Además, las bacterias sustentan grandes cadenas alimentarias al ser capaces de convertir distintas fuentes de energía en biomasa para otros organismos gracias a sus diversas capacidades metabólicas. El estudio de la composición y la ecología de los ecosistemas microbianos es de vital importancia, no sólo para la comprensión de sus roles funcionales, sino también para el desarrollo de herramientas de predicción que permitan una gestión eficiente de los recursos (Eren et al., 2013). En consecuencia, no existe ninguna subdisciplina de la ecología química ajena a la creciente concienciación sobre la importancia de los microorganismos en todos los ámbitos. La ecología química microbiana es un campo de investigación en expansión, en el que se hace hincapié en la diversidad de los compuestos químicos de origen microbiano y en la necesidad de una mejor comprensión de su producción y de su metabolismo (Romeo, 2013).

La cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (GC-MS) puede aplicarse a la determinación en múltiples matrices de los llamados biomarcadores químicos, que pueden ser componentes estructurales específicos o metabolitos microbianos. A continuación se reseñan, brevemente, algunas aplicaciones de herramientas cromatográficas al análisis tanto de constituyentes estructurales como de metabolitos microbianos.

Lípidos estructurales microbianos

Una comunidad microbiana se caracteriza por su estructura y su función. La *estructura* se define como la ordenación y distribución de los diferentes componentes de la comunidad microbiana, incluyendo el número de especies y su abundancia relativa, su distribución espacial y los componentes abióticos asociados a esta distribución. Y la *función* se entiende, en términos generales, como actividad microbiana. Las bacterias y los hongos son los grupos dominantes en la biomasa microbiana y su abundancia se puede estimar básicamente de tres formas: microscopía, inhibición selectiva y análisis de marcadores bioquímicos, que incluyen tanto componentes de las membranas como de las paredes celulares. Los componentes estructurales básicos de la célula bacteriana (procariontes) son la pared celular, la membrana plasmática, el ADN nuclear y los ribosomas. En las bacterias Gram positivo (G+) la membrana plasmática está rodeada por una gruesa pared celular que contiene ácidos teicoicos y peptidoglicano. Las bacterias Gram negativo (G-) tienen una pared mucho más delgada, que a su vez está rodeada por una membrana celular externa que es muy similar a la membrana plasmática. Las paredes celulares de las bacterias G- contienen peptidoglicano pero carecen de ácidos teicoicos. Los hongos (eucariotes) tienen también sus propios biomarcadores específicos que son parte de la membrana celular (**Figura 1**).

Así pues, el aislamiento directo de los componentes celulares de las comunidades microbianas completas representa un método importante para la evaluación cuantitativa de la abundancia microbiana y de la composición de dichas comunidades. En este contexto, el análisis de ácidos grasos celulares ha demostrado ser particularmente útil para la caracterización e identificación de diferentes grupos microbianos.

Perfiles de las comunidades microbianas vía análisis de ácidos grasos

Todas las membranas celulares contienen ácidos grasos (fatty acids, FAs), unidos generalmente al glicerol por un enlace de tipo éster constituyendo los fosfolípidos de

los ácidos grasos (phospholipid fatty acids, PLFAs); éstos se extraen y esterifican para formar metil ésteres de ácidos grasos (fatty acid methyl esters, FAMES). El perfil resultante del análisis de FAMES por GC-MS constituye una "huella dactilar" de los microorganismos presentes en una muestra, pues contiene algunos biomarcadores microbianos (Figura 1).

Para extraer FAs, al igual que para extraer cualquier otra clase de lípidos, la elección del procedimiento adecuado debe tener en cuenta, entre otras consideraciones, el origen animal, vegetal o microbiano de la muestra. Sin embargo, los ácidos grasos se extraen habitualmente con mezclas de disolventes orgánicos polares y no-polares. Cualquiera que sea el método de extracción elegido, el extracto obtenido se suele analizar por GC, razón por la cual los FAs polares han de ser transformados en sus derivados metilesterificados (FAMES) menos polares, habitualmente mediante una metanolisis alcalina suave (White and Ringelberg, 1998) o utilizando hidróxidos como el hidróxido de trimetilsulfonio (TMSH) (Gómez-Brandón et al., 2008).

Con la metodología que proponemos (Gómez-Brandón et al., 2008), basada en una extracción con el método clásico de Folch modificado y derivatización con TMSH, es posible determinar la cantidad total de PLFAs, la presencia de clases estructurales particulares (saturados, insaturados, *iso*, *anteiso*, ...) y también PLFAs individuales utilizados como biomarcadores de grupos microbianos específicos (G+, G- y hongos) (Figura 1). Ciertos PLFAs pueden utilizarse como biomarcadores para determinar no sólo la presencia sino la abundancia de grupos microbianos específicos (Zelles, 1997). Para representar los PLFAs¹ bacterianos se ha seleccionado la suma de i14:0, i15:0, a15:0, i16:0 y a17:0 para bacterias Gram+ y de 16:1w7c, 17:1w7c, 18:1w7c, cy17:0 y cy19:0 para bacterias Gram-; como biomarcadores fúngicos se han usado el 18:2w6c y el 18:1w9c. Es importante destacar que la mayoría de los PLFAs están presentes en un amplio rango taxonómico de microorganismos en concentraciones diferentes, por lo que no pueden utilizarse para cuantificar o determinar especies o géneros específicos en comunidades microbianas completas, pero sí para evaluar cambios en la abundancia relativa de grupos taxonómicos amplios como los que se han mencionado

(Bardgett, 2005). El análisis de la composición de PLFAs es una de las herramientas más comúnmente utilizadas, aparte de los cultivos en placa, para la investigación de poblaciones microbianas en estudios ecológicos (Øvreås, 2000). La mayor potencia de este enfoque basado en perfiles lipídicos, en comparación con otro tipo de análisis de la comunidad microbiana, es que los PLFAs se sintetizan rápidamente durante el crecimiento microbiano y también se degradan rápidamente después de la muerte microbiana y, además, no son moléculas de reserva energética, por lo que proporcionan una "huella dactilar" precisa y real de la comunidad viva en el momento del análisis (Evershed et al., 2006).

En el primer caso de estudio que se comenta, se ha utilizado la metodología analítica optimizada para estudiar las comunidades microbianas de matrices medioambientales sólidas con un alto contenido de materia orgánica mediante su composición en FAMES. Los datos obtenidos permiten establecer la importancia de los diferentes grupos de microorganismos en las diferentes matrices sólidas (Figura 2). En este caso, el análisis de los perfiles de PLFAs indica que la estructura de la comunidad microbiana difiere entre muestras de suelo, estiércol, compost y vermicompost. Además, tanto la biomasa microbiana viable (medida como contenido total en PLFAs) como la abundancia de bacterias y hongos son mucho mayores en las muestras de vermicompost que en las de compost y estiércoles iniciales.

También se analizaron los perfiles de FAMES para evaluar la diversidad y cantidad de ácidos grasos y comparar las distintas huellas biológicas. En las muestras analizadas, se identificaron y cuantificaron por GC-MS 21 PLFAs, de entre 10 y 18 átomos de carbono, saturados, mono- y poliinsaturados y ramificados y sus respuestas se procesaron mediante técnicas de análisis multivariante. Este enfoque resultó muy útil para comparar las comunidades microbianas en residuos animales no tratados y en los productos finales resultantes de los procesos de su degradación biológica (compost y vermicompost) (Gómez-Brandón et al., 2011; Lores et al., 2006).

Aunque la mayoría de los estudios sobre semioquímicos en invertebrados se han llevado a cabo en insectos, ya sea en relación con las feromonas sexuales o con el

¹ La nomenclatura propuesta por la IUPAC (1977) es A:B ω C. La letra A se refiere al número total de átomos de carbono, seguido por el número de dobles enlaces (B) y su posición (C), tomando como referencia el átomo de carbono ω . Los átomos de carbono de los ácidos grasos se numeran empezando por el extremo carboxilo. Los átomos 2 y 3 se denominan α y β respectivamente; y el átomo del grupo metilo al final de la cadena hidrocarbonada se conoce como ω . Las configuraciones *cis* y *trans* se representan con las letras *c* y *t* respectivamente. Los prefijos *i*, *a* y *10 Me* indican la existencia de un grupo metilo en posiciones *iso* (penúltimo carbono), *anteiso* (antepenúltimo carbono), y en el décimo carbono; y el prefijo *cy* simboliza a los ácidos grasos con un anillo interno de ciclopropano.

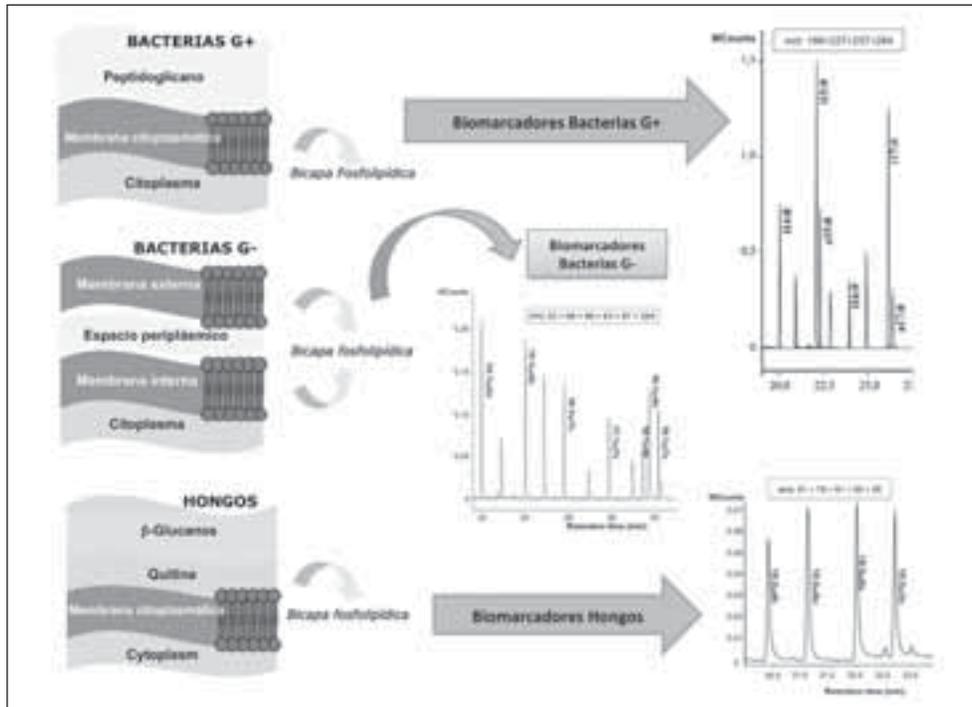


Figura 1. Esquema de las cubiertas celulares y biomarcadores de la fracción fosfolipídica de las membranas de varios grupos de Microbiota: cromatogramas de iones seleccionados para ácidos grasos poliinsaturados, moninsaturados, y saturados de cadena ramificada; representativos de hongos, bacterias Gram – y bacterias Gram +, respectivamente.

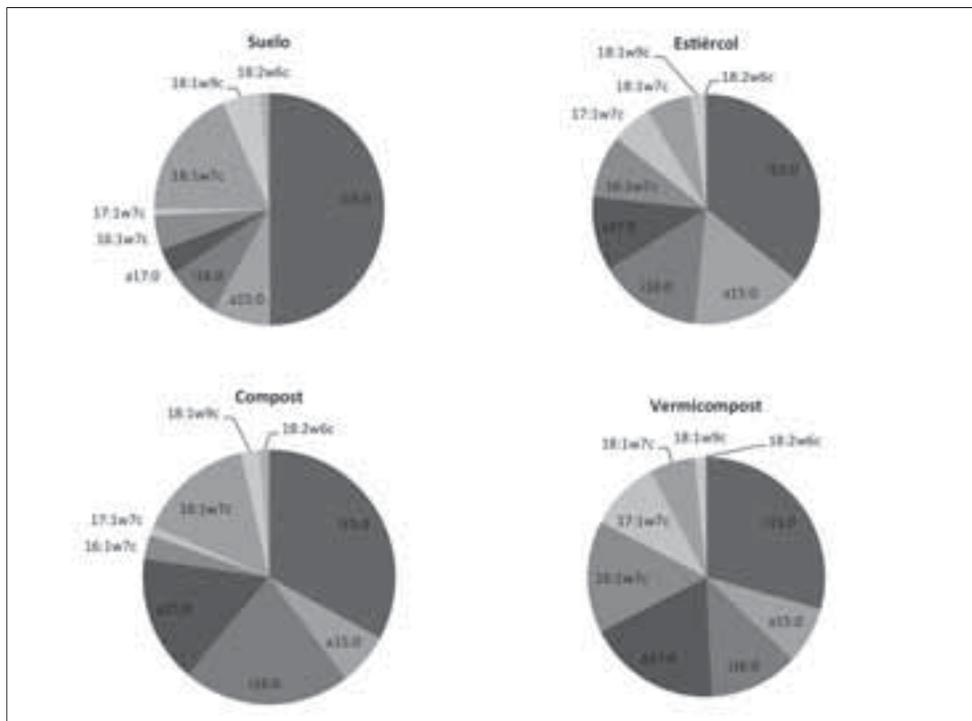


Figura 2. Abundancia de cada PLFA biomarcador ($\mu\text{g g}^{-1}$) de bacterias G+ (i14: 0, i15: 0, a15: 0, i16: 0 y a17: 0), bacterias G- (16: 1w7c, 17: 1w7c, 18: 1w7c) y hongos (18: 2w6c, 18: 1w9c) en las diferentes muestras sólidas estudiadas.

control de plagas (Grasswitz and James, 2009), la metodología analítica que se ha resumido previamente, puede utilizarse también para estudiar interacciones bióticas entre los microorganismos y un importante grupo de animales del suelo, las lombrices de tierra, tanto en estudios de ecología del suelo básicos como aplicados.

Los efectos de las lombrices de tierra sobre la comunidad microbiana varían dependiendo de la especie y de su dieta. El vermicompostaje, método muy eficaz para convertir los residuos sólidos orgánicos en biofertilizantes, es un proceso acelerado que implica la biooxidación y la estabilización del residuo, como resultado de las interacciones entre algunas especies de lombrices de tierra y los microorganismos. *Eisenia andrei*, *Eisenia fetida* y *Perionyx excavatus* son especies de lombrices de tierra muy utilizadas para procesar sustratos orgánicos en el vermicompostaje.

El análisis multivariante de 25 PLFAs (i14:0, 14:0, i15:0, a15:0, 15:0, i16:0, 16:1 ω 9, 16:1 ω 7, 16:1 ω 5, 16:0, 10Me16:0, i17:0, a17:0, cy17:0, 17:0, 10Me17:0, 18:2 ω 6,9, 18:1 ω 9, 18:1 ω 7, 18:0, 10Me18:0, cy19:0, 20:4 ω 6, 20:5 ω 3, 20:3 ω 6) diferencia claramente entre el vermicompost obtenido con las tres especies diferentes de lombrices de tierra, con independencia de si el estiércol utilizado para el vermicompostaje era de vaca, caballo o conejo (**Figura 3**). Esto indica que hay diferentes perfiles de PLFAs asociados con los vermicompost y no relacionados con el tipo de estiércol animal utilizado, sino más bien con las especies de lombrices de tierra y/o su microflora intestinal endosimbiótica (Gómez-Brandón et al., 2012). Por otra parte, la separación entre vermicompost y sustratos de control (estiércoles procesados sin lombrices) también fue muy clara (**Figura 3**), lo que indica que las lombrices de tierra desempeñan un papel clave en la configuración de la estructura de la comunidad microbiana en los residuos orgánicos durante el proceso de vermicompostaje. Se encontraron resultados similares analizando también los perfiles de FAMES (Lores et al., 2006) o la evolución de los PLFAs a través del proceso de vermicompostaje de bagazo de uva (Gómez-Brandón et al., 2010).

Metabolitos microbianos

Las bacterias producen un amplio rango de metabolitos secundarios que facilitan tanto la competición entre especies como la colonización de diversos nichos ecológicos (Ortori et al., 2011). Así, se ha demostrado la existencia de interacciones bioquímicas entre los microorganismos y su medio mediante a través de la producción de compuestos orgánicos volátiles de origen microbiano

(MVOCs) (Davis et al., 2013). Además de para evaluar el contexto funcional y ecológico de las señales MVOC en la exploración de importantes rutas metabólicas implicadas en su producción, los MVOCs también se pueden utilizar para controlar la “invasión” microbiana de productos de consumo, como por ejemplo la contaminación microbiológica de alimentos (García-Cañas and Cifuentes, 2007) o de cosméticos (Álvarez-Rivera et al., 2013). Se ha intentado también establecer correlaciones entre los MVOCs y especímenes específicos, para determinar si algunos MVOCs podrían servir como marcadores para la detección de ciertas especies microbianas en particular.

La espectrometría de masas, incluyendo su integración con técnicas de separación como la cromatografía líquida, la cromatografía de gases y la electroforesis capilar, es una potente herramienta bioanalítica para estudios de metabolómica. En aquellas aplicaciones en las que se conocen los metabolitos de interés y existe disponibilidad de patrones puros, la cuantificación se puede llevar a cabo con un alto nivel de precisión, exactitud y sensibilidad; sin embargo, dichos metabolitos han de ser extraídos de las muestras de un modo robusto y cuantitativo (o, al menos, conocido) y, así, la etapa de tratamiento de muestra previa al análisis se convierte, como en tantos otros ámbitos, en un aspecto clave de este tipo de estudios (Dunn and Hankemeier, 2013).

La microextracción en fase sólida en espacio de cabeza (Headspace Solid-Phase Microextraction, HSSPME) es una opción muy interesante, ya que integra las etapas de extracción, concentración e introducción de muestra en un único paso, reduciendo el tiempo de preparación de muestra e incrementando simultáneamente la sensibilidad en relación con otras técnicas de extracción. De hecho, el acoplamiento con cromatografía de gases-espectrometría de masas (HSSPME-GC/MS) se considera una interesante opción para el análisis de MVOCs (Zhang and Li, 2010).

Detección de contaminación microbiana en cosméticos mediante biomarcadores volátiles

En este contexto, se propone un método basado en MVOCs para la detección rápida de contaminación microbiana. Los resultados demuestran que es factible identificar microorganismos viables en cosméticos, cualitativamente, e incluso cepas microbianas específicas, mediante la detección de biomarcadores volátiles, lo que resulta un complemento muy valioso para otros métodos de detección rápida. En este tipo de aplicación hay que contemplar dos cuestiones preliminares importantes: la

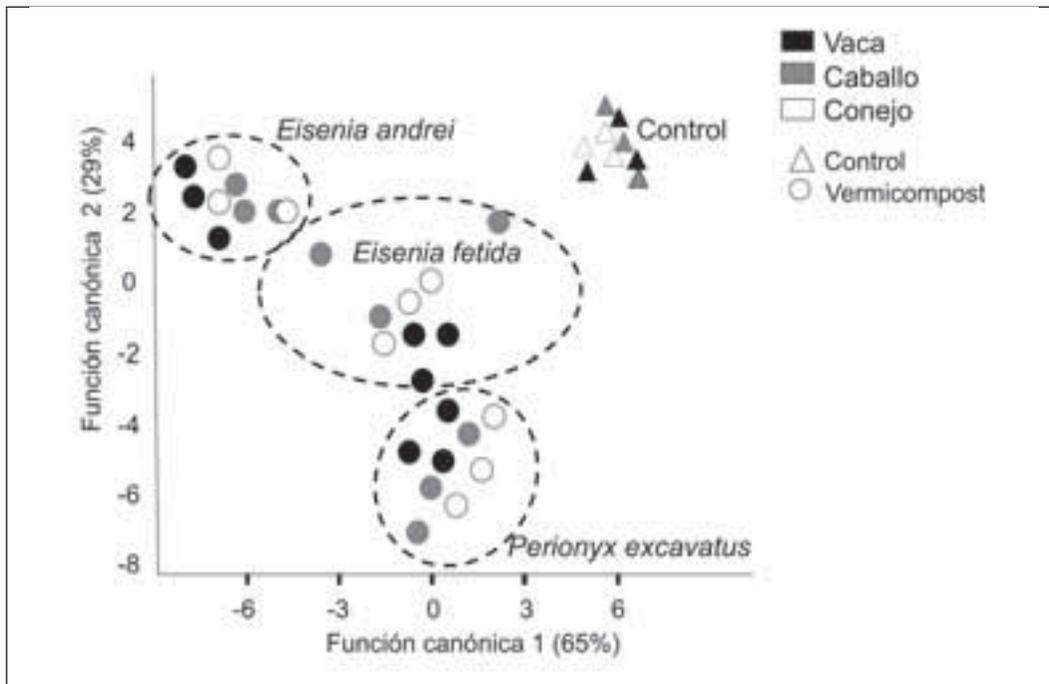


Figura 3. Diagrama de dispersión obtenido como resultado del Análisis Lineal Discriminante (LDA) ($Wilks\leftrightarrow 1 = 0,00099$, $p < 0,0001$) realizado para los PLFAs de los vermicompost producidos con las tres especies epigeas de lombriz (*Eisenia andrei*, *E. fetida* y *Perionyx excavatus*). Se observa la modificación específica de la composición de la comunidad microbiana de tres estiércoles animales diferentes (vaca, caballo y conejo –iniciales-) después de un mes de vermicompostaje con las tres especies distintas de lombriz de tierra. Cada control representa el mismo tratamiento, pero sin lombrices.

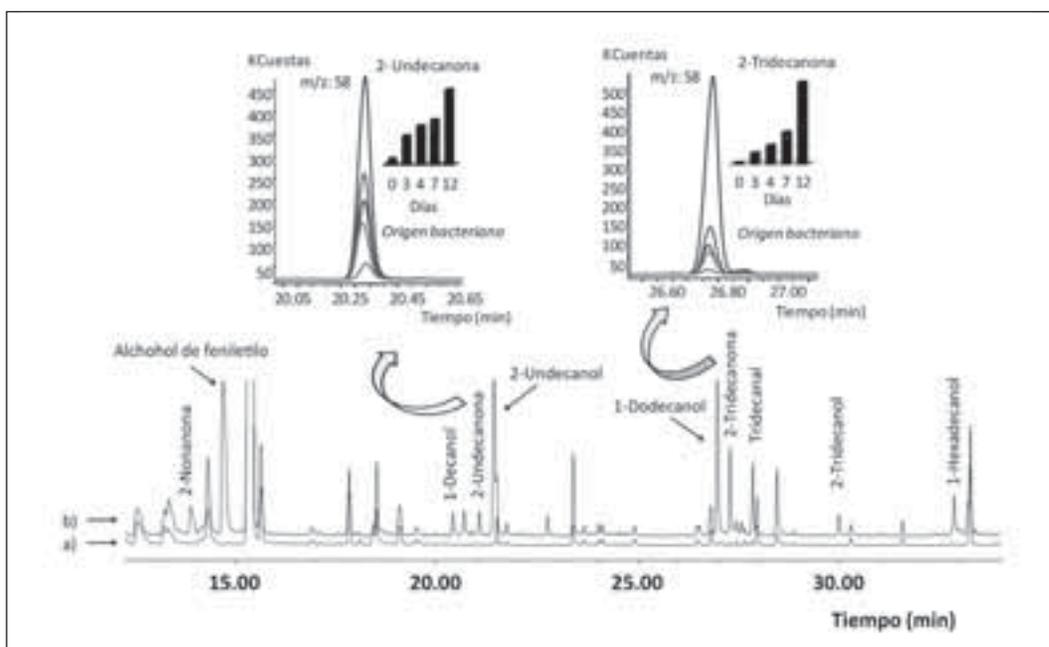


Figura 4. Cromatogramas de ion total (TIC) superpuestos de medio de cultivo TSB (a) y de medio de cultivo TSB incubado con *Pseudomonas fluorescens* (b). Perfiles cinéticos que muestran la producción de 2-undecanona y 2-tridecanona en una crema de manos incubada con *P. fluorescens*

identificación fiable de los diferentes MVOCs y el análisis de blancos. Para identificar de modo seguro los volátiles de origen microbiano estudiados, es muy recomendable el uso de herramientas complementarias a las bibliotecas de espectros de masas, como los índices de retención de Kovats -especialmente cuando no existen patrones adecuados-, que permiten distinguir compuestos relacionados tales como isómeros geométricos y posicionales, los cuales producen espectros de masas muy similares entre sí. Debe prestarse también una atención muy especial al análisis de blancos, tanto de los medios de cultivo como de las muestras cosméticas ensayadas, puesto que ambos son fuentes abundantes de compuestos volátiles en sí mismas. Esta complejidad en los perfiles cromatográficos se afronta fácilmente gracias a la selectividad del modo SIM (Selected-Ion Monitoring o Monitorización Selectiva de Iones) de la espectrometría de masas.

No es necesario que los cosméticos sean estériles pero deben estar adecuadamente conservados, o protegidos de algún modo, del deterioro y la contaminación microbiana. El simple uso normal y cotidiano de productos cosméticos ya los expone repetidamente a la acción de microorganismos en la saliva, las manos sucias, el agua de grifo, etc. (Sutton, 2006). La contaminación bacteriana más común en cosméticos incluye los géneros *Pseudomonas spp.*, *Klebsiella spp.* y *Serratia spp.* entre otros (Geiss, 2006). Así, para llevar a cabo el análisis de los compuestos volátiles producidos por esta clase de bacterias en cosméticos, se han seleccionado miembros representativos de los géneros mencionados: *P. fluorescens*, *S. marcescens* y *K. pneumoniae*. *Escherichia coli* se incluyó también en el estudio debido a su presencia ubicua en entornos humanos.

Las bacterias seleccionadas se hicieron crecer en un medio de cultivo adecuado y los compuestos volátiles producidos metabólicamente se analizaron mediante HS-SPME-GC/MS (Alvarez-Rivera et al., 2013). Se detectaron varios MVOCs comunes, al menos, a tres de las bacterias estudiadas; concretamente las cetonas 2-nonanona, 2-undecanona, 2-tridecanona y 2-pentadecanona; y los alcoholes grasos 1-decanol, 1-dodecanol, 2-tridecanol y 1-pentadecanol, además del 2-feniletanol; si bien cada especie mostró un perfil particular y distintivo. La Figura 4 muestra la superposición de cromatogramas de ion total (TIC, Total Ion Chromatogram) del caldo de soja tríplico (TSB, tryptic soy broth) que se ha utilizado como medio de crecimiento bacteriano (blanco) y del mismo medio TSB incubado con *P. fluorescens*. En el cromatograma del cultivo bacteriano, se identifican 10 compuestos claramente diferenciados del blanco y relacionados, por tanto, con el crecimiento de *Pseudomonas*. Pero además,

la combinación HSSPME-GC/MS permite el seguimiento del perfil cinético de algunas sustancias volátiles identificadas como potenciales biomarcadores de contaminación microbiana (Figura 4). Para evaluar en detalle el comportamiento cinético de los MVOCs identificados, se inoculó una crema de manos con *P. fluorescens* y se incubó durante períodos crecientes de tiempo hasta un total de 12 días. Como puede observarse, las respuestas obtenidas para la 2-undecanona y la 2-tridecanona mostraron un crecimiento significativo durante el periodo de incubación (especialmente pronunciado para la 2-tridecanona entre los días 7 y 12, lo que sugiere la tendencia exponencial típica de los metabolitos de crecimiento bacteriano). Aunque estrictamente, sólo los experimentos con nutrientes que contengan precursores marcados pueden demostrar de manera concluyente si un determinado compuesto es en realidad producido por una bacteria determinada, los datos confirmados en la bibliografía disponible y la evidencia cinética apoyan la hipótesis de que los compuestos volátiles identificados son biomarcadores de presencia bacteriana. Más aún, la cinética de consumo de algunos de los ingredientes cosméticos son prueba evidente de actividad metabólica bacteriana en sustratos cosméticos (Álvarez-Rivera et al., 2013), ya que muestran un comportamiento cinético completamente opuesto al de los metabolitos relacionados con el crecimiento bacteriano.

BIBLIOGRAFÍA

- Agrawal A.A., Petschenka G., Bingham R.A., Weber M.G., Rasmann S. (2012) Toxic cardenolides: chemical ecology and coevolution of specialized plant-herbivore interactions. *New Phytologist* 194:28-45.
- Álvarez-Rivera G., De Miguel T., Llompарт M., Garcia-Jares C., Villa T.G., Lores M. (2013) A novel outlook on detecting microbial contamination in cosmetic products: analysis of biomarker volatile compounds by solid-phase microextraction gas chromatography-mass spectrometry. *Analytical Methods* 5:384-393.
- Bardgett R.D. (2005) *The biology of soil: a community and ecosystem approach* Oxford University Press.
- Davis T.S., Crippen T.L., Hofstetter R.W., Tomberlin J.K. (2013) Microbial volatile emissions as insect semiochemicals. *Journal of Chemical Ecology* 39:840-859.
- Dunn W.B., Hankemeier T. (2013) Mass spectrometry and metabolomics: past, present and future. *Metabolomics* 9:1-3.

- Eren A.M., Maignien L., Sul W.J., Murphy L.G., Grim S.L., Morrison H.G., Sogin M.L. (2013) Oligotyping: differentiating between closely related microbial taxa using 16S rRNA gene data. *Methods in Ecology and Evolution* 4:1111-1119.
- Evershed R.P., Crossman Z.M., Bull I.D., Mottram H., Dungait J.A., Maxfield P.J., Brennan E.L. (2006) 13 C- Labelling of lipids to investigate microbial communities in the environment. *Current Opinion in Biotechnology* 17:72-82.
- García-Cañas V., Cifuentes A. (2007) Detection of microbial food contaminants and their products by capillary electromigration techniques. *Electrophoresis* 28:4013-4030.
- Geiss P.A. (2006) *Cosmetic Microbiology, A Practical approach*, in: P. A. Geiss (Ed.), Taylor & Francis, New York. pp. 167.
- Gómez-Brandón M., Lores M., Domínguez J. (2008) Comparison of extraction and derivatization methods for fatty acid analysis in solid environmental matrixes. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 392:505-514.
- Gómez-Brandón M., Lores M., Domínguez J. (2012) Species-specific effects of epigeic earthworms on microbial community structure during first stages of decomposition of organic matter, *PloS One* 7 (2): e31895.
- Gómez-Brandón M., Lazcano C., Lores M., Domínguez J. (2010) Detritivorous earthworms modify microbial community structure and accelerate plant residue decomposition. *Applied Soil Ecology* 44:237-244.
- Gómez-Brandón M., Aira M., Lores M., Domínguez J. (2011) Epigeic earthworms exert a bottleneck effect on microbial communities through gut associated processes, *PloS One* 6 (9): e24786.
- Grasswitz T., James D. (2009) Influence of hop yard ground flora on invertebrate pests of hops and their natural enemies. *Journal of Applied Entomology* 133:210-221.
- Jones G.R., Oldham N.J. (1999) Pheromone analysis using capillary gas chromatographic techniques. *Journal of Chromatography A* 843:199-236.
- Lores M., Gómez-Brandón M., Pérez-Díaz D., Domínguez J. (2006) Using FAME profiles for the characterization of animal wastes and vermicomposts. *Soil Biology and Biochemistry* 38:2993-2996.
- Millar J.G. (2012) Role of Gas Chromatography in the identification of pheromones and related semiochemicals. En: C. Poole (Ed), *Gas Chromatography*, Elsevier, pp. 679-687.
- Mori K. (2013) *Chemical Ecology*. En: Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering, Elsevier, pp. 1-3.
- Ortori C.A., Dubern J.-F., Chhabra S.R., Cámara M., Hardie K., Williams P., Barrett D.A. (2011) Simultaneous quantitative profiling of N-acyl-L-homoserine lactone and 2-alkyl-4 (1H)-quinolone families of quorum-sensing signaling molecules using LC-MS/MS. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 399:839-850.
- Øvreås L. (2000) Population and community level approaches for analysing microbial diversity in natural environments. *Ecology Letters* 3:236-251.
- Pickett J.A. (2006) Plant volatiles yielding new ways to exploit plant defence. En: Dicke, M., Takken, W. (Eds.), *Chemical Ecology: from Gene to Ecosystem*, Springer, pp. 161-173.
- Romeo J.T. (2013) Preface: microbial chemical ecology. *Journal of chemical ecology* 39:807-808.
- Sutton S.V.W. (2006) *Cosmetic Microbiology, A Practical approach*, in: P. A. Geiss (Ed.), Taylor & Francis, New York. pp. 112.
- White D., Ringelberg D. (1998) Signature Lipid Biomarker Analysis'. In: Burlage, R. S., Atlas, R., Stahl, D., Geesey, G., Saylor, G.(Eds.) *Techniques in Microbial Ecology*. Oxford University Press, Inc., New York, pp. 255-272.
- Williams P., Winzer K., Chan W.C., Camara M. (2007) Look who's talking: communication and quorum sensing in the bacterial world. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London B: Biological Sciences* 362:1119-1134.
- Zelles L. (1997) Phospholipid fatty acid profiles in selected members of soil microbial communities. *Chemosphere* 35:275-294.
- Zhang Z., Li G. (2010) A review of advances and new developments in the analysis of biological volatile organic compounds. *Microchemical Journal* 95:127-139.

NOTICIAS DE LA SECyTA

XV REUNIÓN CIENTÍFICA DE LA SECyTA (44ª REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

La XV Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines – SECyTA2015 - (44ª Reunión Científica del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines) se celebró conjuntamente con la VII Reunión Nacional de la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM2015), en Castellón de la Plana, en la Universitat Jaume I de Castelló (UJI), del 27 al 30 de Octubre de 2015 con los Drs. Juan Vicente Sancho Llopis y Joaquín Beltrán Arandes como Chairman y Co-Chairman, respectivamente. Esta es la segunda vez en la historia que la SECyTA y la SEEM decidieron aunar esfuerzos y celebrar conjuntamente sus respectivas Reuniones. Mientras que la primera jornada estuvo dedicada exclusivamente a la Reunión de la SEEM, los tres días restantes se centran en la Reunión Científica de la SECyTA.

El programa científico estuvo estructurado en conferencias plenarias, conferencias invitadas, comunicaciones orales (incluyendo una doble sesión para jóvenes investigadores optando a los Premios José Antonio García Domínguez), sesiones clásicas de pósteres, así como tres sesiones de discusión flash de pósteres previamente seleccionados que tuvieron una gran acogida entre los asistentes. Además, la Reunión estuvo acompañada de una exposición comercial donde se presentaron novedades en Instrumentación Analítica y modernas metodologías de ensayo utilizadas en Química y Bioquímica, así como diversos Workshops organizados por algunas de las empresas colaboradoras y/o patrocinadoras de la Reunión.

El programa científico presentó los últimos desarrollos en técnicas analíticas de espectrometría de masas, de separación cromatográfica y afines, así como sus múltiples acoplamientos y aplicaciones. La versatilidad e importancia creciente de todas estas herramientas analíticas se hizo evidente a lo largo de toda la Reunión dada la gran variedad de áreas temáticas a las que se dedicaron una especial atención. Dichas áreas temáticas fueron:

- Fundamentos y Quimiometría.
- Nuevos desarrollos en instrumentación.
- Preparación de muestra.
- Análisis clínicos y de productos farmacéuticos.
- Técnicas ómicas.
- Análisis de alimentos.

- Medio ambiente.
- Procesos y productos industriales.
- Análisis elemental, especiación y análisis isotópico.
- Otras aplicaciones.

Es de reseñar el considerable número de comunicaciones solicitadas y la calidad de las mismas, presentándose un total de 192 que quedaron distribuidas de la siguiente forma:

- Comunicaciones invitadas 9 (4 plenarias y 5 *keynotes*)
- Comunicaciones orales42 (12 de las cuales correspondieron a jóvenes investigadores)
- Comunicaciones tipo póster141 (18 de ellos se presentaron en sesiones flash).

Los conferenciantes invitados a la Reunión combinada de la SEEM y SECyTA fueron los siguientes:

Facundo M. Fernández
Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA
“Ambient Ionization with Plasmas and Charged Droplets”

Pablo Martínez-Lozano Sinués
ETH Zurich, Switzerland
“Breath Analysis: Transitioning from Bench to Bedside”

Bruno José Fernandes Oliveira Manadas
CNC - Center for Neuroscience and Cell Biology, University of Coimbra, Coimbra, Portugal / Biocant-Biotechnology Innovation Center, Cantanhede, Portugal
“Neuro-Mass Spectrometry: from Basic Research to Bed Side, and Back Again?”

Jana Hajslova
Institute of Chemical Technology, Prague, Czech Republic
“Lipidomics Based On High Resolution Mass Spectrometry: A Novel Strategy Employed In Food And Nutrition Research”

Eric J. Reiner

*University of Toronto, Department of Chemistry,
Toronto, ON Canada*

“Strategies and Techniques for Identifying
Unknown Compounds in Environmental Samples”

Paola Dugo

*University of Messina, Dipartimento SCIFAR,
Messina, Italy / Centro Integrato di Ricerca,
Università Campus Bio-Medico, Roma, Italy /
Chromaleont s.r.l. A start-up of the University of
Messina, Messina, Italy*

“Comprehensive Two-Dimensional Liquid Chromato-
graphy as a Powerful Tool for Food Applications”

José Manuel Florêncio Nogueira

*Centro de Química e Bioquímica, Universidade de
Lisboa, Lisboa, Portugal*

“New Analytical Strategies for Sorption-Based
Methods”

Coral Barbas

*CEMBIO (Centre for Metabolomics and
Bioanalysis), Facultad de Farmacia, Campus
Montepríncipe, Universidad San Pablo CEU,
Madrid, Spain*

“Analytical Developments and Biomedical
Applications of Capillary Electrophoresis in Non-
Targeted Metabolomics”

Félix Hernández

*Institute for Pesticides and Water (IUPA), University
Jaume I, Castellón, Spain*

“Investigation of Metabolites/Transformation
Products of Emerging Contaminants in the Aquatic
Environment by HRMS”

Después de la ceremonia de clausura del viernes 30 de Octubre, se celebró la entrega de la XI edición de los premios José Antonio García Domínguez, patrocinados por Bruker, a las mejores comunicaciones orales y tipo cartel que merecieron el reconocimiento del Jurado y que se detallan en la siguiente sección.

Por otra parte, dentro de las diversas actividades sociales programadas durante la celebración de esta Reunión cabe destacar las visitas guiadas que tuvieron lugar por Las Villas de Benicàssim y el casco histórico de Castellón de la Plana, así como la cena de gala que tuvo lugar en Torrelamina (Les Alqueries, Castellón) que deparó un entorno formidable.

Finalmente, felicitar desde estas líneas al Comité Organizador y Científico y, especialmente, a los Dres. Juan Vicente Sancho Llopis y Joaquín Beltrán Arandes responsables de la Reunión, por la gran labor desarrollada y que permitió que estas Jornadas fueran todo un éxito. Además de la perfecta organización de la Reunión, cabe destacar el gran número de becas concedidas por la SECyTA, lo que facilitó la asistencia numerosa de jóvenes investigadores, dándoles la oportunidad de ampliar sus conocimientos teóricos, de conocer los últimos avances instrumentales sobre una amplia diversidad de herramientas analíticas y sus acoplamientos, así como la oportunidad de profundizar en nuevos tratamientos de preparación de muestra y sus aplicaciones para el análisis clínico, farmacéutico, medioambiental y de alimentos, entre otras áreas de especialización.

F. Javier Moreno

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

XI EDICIÓN PREMIOS JOSÉ ANTONIO GARCÍA DOMÍNGUEZ

En el marco de la XV Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) celebrada en Castellón de la Plana del 28 al 30 de octubre de 2015 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 XI 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 M^a García Campaña, Rosa M^a Marcé Recasens y Yolanda Picó García, que tras debatir los méritos científicos de las presentaciones, tomó por unanimidad los siguientes acuerdos:

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

Comunicación: YS-05

Título: FINGERPRINTING ANALYSIS OF EXTRACTS OF LICORICE BY COMPREHENSIVE TWO-DIMENSIONAL LIQUID CHROMATOGRAPHY

Autores:

Lidia Montero⁽¹⁾, Elena Ibáñez⁽¹⁾, Mariateresa Russo⁽²⁾, Rosa di Sanzo⁽²⁾, Luca Rastrelli⁽³⁾, Anna Lisa Piccinelli⁽³⁾, Rita Celano⁽³⁾, Alejandro Cifuentes⁽¹⁾, Miguel Herrero⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research (CIAL-CSIC), Madrid, Spain

⁽²⁾ Laboratory of Food Chemistry, Università Mediterranea di Reggio Calabria, Reggio Calabria, Italy

⁽³⁾ Dipartimento di Farmacia, Università di Salerno, Fisciano, Italy

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

Comunicación: YS-04

Título: CLASSIFICATION AND CHARACTERIZATION OF MYCORRHIZAL ROSEMARY PLANTS BY UHPLC-HRMS COMPOSITIONAL PROFILES AND CHEMOMETRICS

Autores:

Raquel Seró⁽¹⁾, Oscar Núñez⁽¹⁾, Javier Saurina⁽¹⁾, Cinta Calvet⁽²⁾, Encarnación Moyano⁽¹⁾

⁽¹⁾ Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Barcelona, Martí I Franqués 1-11, 08028, Barcelona

⁽²⁾ IRTA, Protecció Vegetal Sostenible, Crta. De Cabrils Km 2, E-08348 Cabrils, Barcelona

En el caso de los premios a las mejores comunicaciones tipo cartel presentadas en la XV Reunión Científica de la SECyTA, el jurado, constituido por Fco. Javier Santos Vicente (presidente), Elena Ibáñez Ezequiel, Belén Gómara Moreno y Begoña Jiménez Luque, tomó por unanimidad los siguientes acuerdos:

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

Comunicación: P-30

Título: EXPLORING POTENTIAL OF GAS CHROMATOGRAPHY WITH ATMOSPHERIC PRESSURE CHEMICAL IONIZATION AND TANDEM MASS SPECTROMETRY FOR SENSITIVE DETERMINATION OF ETHYL GLUCURONIDE IN HAIR

Autores:

Tania Portolés⁽¹⁾, Juliet Kinyua⁽²⁾, Alexander van Nuijs⁽²⁾, Delphine Cappelle⁽²⁾, Juan V. Sancho⁽¹⁾, Félix Hernández⁽¹⁾

⁽¹⁾ Research Institute for Pesticides and Water, University Jaume I, 12071 Castellón, Spain

⁽²⁾ Toxicological Centre, University of Antwerp, Universiteitsplein 1, 2610 Wilrijk, Belgium

2^o Premio al mejor Póster (300 euros)

Comunicación: P-44

Título: UHPLC-API-MS/MS FOR THE DETERMINATION OF POLYFLUORINATED COMPOUNDS

Autores:

Juan Francisco Ayala Cabrera, Francisco Javier Santos Vicente, Encarnación Moyano Morcillo

Department of Analytical Chemistry, Univ. of Barcelona. Av. Diagonal 645, 08028-Barcelona, Spain

La entrega de los premios tuvo lugar el 30 de octubre de 2015, durante la ceremonia de clausura de la XV Reunión Científica de la SECyTA.

Belén Gómara
Secretaria de la SECyTA

1^{er} Premio a la mejor Comunicación Oral (800 euros): comunicación YS-05

FINGERPRINTING ANALYSIS OF EXTRACTS OF LICORICE BY COMPREHENSIVE TWO-DIMENSIONAL LIQUID CHROMATOGRAPHY

Lidia Montero^{(1)*}, Elena Ibáñez⁽¹⁾, Mariateresa Russo⁽²⁾, Rosa di Sanzo⁽²⁾, Luca Rastrelli⁽³⁾, Anna Lisa Piccinelli⁽³⁾, Rita Celano⁽³⁾, Alejandro Cifuentes⁽¹⁾, Miguel Herrero⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research (CIAL-CSIC), Madrid, Spain.

⁽²⁾ Laboratory of Food Chemistry, Dipartimento di Agraria (QuaSic.A.Tec.), Università Mediterranea di Reggio Calabria, Reggio Calabria, Italy.

⁽³⁾ Dipartimento di Farmacia, Università di Salerno, Fisciano, Italy

*e-mail: lidia.montero@csic.es

Licorice (*Glycyrrhiza glabra*) is an herbaceous perennial plant, belonging to the Leguminosae family and it is one of the oldest and most popular herbal medicines in the world. A wide array of biological activities have been related to this plant, including antiulceric, anti-inflammatory, antispasmodic, expectorant, antiallergic, antidepressive, antiviral and antioxidant activities. Besides, licorice has been used in the food industry as a sweetener and a flavor enhancer.

Glycyrrhiza glabra is native to central and south-western Asia and the Mediterranean region, but the licorice from the region of Calabria (Italy) has been described as one those with highest quality. In order to avoid possible adulterations, it is important to search metabolomic markers that may allow the correct identification of licorice species and varieties. In this regard, the content on secondary metabolites could be employed for the geographical identification of licorice due to fact that the composition of the secondary metabolites in this plant may significantly vary depending on the geographical area of origin. These metabolites present in licorice are mainly triterpene saponins and phenolic compounds including flavanones, chalcones, flavones, isoflavones and isoprenylated flavonoids.

Due to the complex composition of this matrix, chromatographic techniques with high separation

power are needed in order to obtain the maximum separation of the compounds.

Therefore, the approach carried out in this work was the development of a comprehensive two-dimensional liquid chromatography method coupled to mass spectrometry (LC x LC-MS IT) for the analysis of licorice extracts from Iran, China and Azerbaijan, as well as two Italian licorices from the region of Calabria, combining ZIC-HILIC and C₁₈ columns in the first and second dimension, respectively. The objective was to establish specific compounds that contribute to the differentiation between samples of different geographical origins.

The results of this work revealed that each sample presented several unique compounds in its metabolic profile. The Chinese licorice was the most different of the analyzed samples, followed by the Azerbaijani and the Iranian samples. While the two Italian licorices were the most similar samples. In conclusion LC x LC has been shown to be able to provide complex metabolic profile useful to reveal specific unique compounds from each sample that could be effectively used as metabolic markers to identify the licorice origin.

ACKNOWLEDGEMENT

This work was funded by Italian Ministry of Research and University (MIUR) and European Commission (Project PON01_00636: Anti-counterfeiting technologies and materials and nanotechnologies for authentication and protection of agrifood excellence – “Fingerimball”).

2^o Premio a la mejor Comunicación Oral (600 euros): comunicación YS-04

CLASIFICATION AND CHARACTERIZATION OF MYCORRHIZAL ROSEMARY PLANTS BY UHPLC-HRMS COMPOSITIONAL PROFILES AND CHEMOMETRICS

Raquel Seró^{(1)*}, Oscar Núñez⁽¹⁾, Javier Saurina⁽¹⁾, Cinta Calvet⁽²⁾, Encarnación Moyano⁽¹⁾

⁽¹⁾ Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Barcelona, Martí I Franqués 1-11, 08028, Barcelona

⁽²⁾ IRTA, Protecció Vegetal Sostenible, Crta. De Cabrils Km 2, E-08348 Cabrils, Barcelona

* e-mail: rsero@ub.edu

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



Rosemary (*Rosmarinus officinalis*) is an aromatic shrub herb that grows wild in the Mediterranean basin. This plant is cultivated worldwide due to its diverse uses as household culinary spice for flavoring, preparation of cosmetic fragrances and in phytotherapy. Furthermore, the antimicrobial and antioxidant properties of rosemary essential oil are of great interest in food, cosmetic and pharmaceutical industries. In addition, long-term studies have shown that scrubland and shrubs contribute to reduction of erosion and improvement of soil quality in Mediterranean environment, and plants with economic potential, such as rosemary, could have an important role in soil rehabilitation and remediation.

R. officinalis colonized with several arbuscular mycorrhizal (AM) fungi have been used for the reclamation of low-nutrient-content soils [1]. These studies revealed that inoculation with AM fungi positively affect rosemary plant growth helping in a better capacity to compete for light with the spontaneous vegetation. Moreover, it is believe that the symbiosis between plant and fungi could alter the composition of plant metabolome, particularly of polyphenols which are the main bioactive compounds in rosemary.

The aim of this work is to explore a suitable methodology to assess the differences between non-inoculated and AM fungi inoculated *R. Officinalis* plants. The characterization and classification can be tackled from compositional profiles as a source of analytical information [2]. For this purpose, a UHPLC-HRMS and UHPLC-MS/HRMS (Q-Orbitrap) using C18 reversed-phase separation has been proposed for the analysis of 10 non-inoculated (control samples) and 50 mycorrhizal rosemary plants (inoculated with 5 different fungi isolates, 10 rosemary plants per fungi).

Full scan MS raw data were employed as metabolic fingerprints to be treated by principal components analysis (PCA), and an interesting pattern distribution regarding the different mycorrhizal and no-mycorrhizal plants was observed. Furthermore, polyphenolic profiles were also employed for rosemary characterization. Thus, MS data was processed by Exact Finder 2.0 software (Thermo Fischer Scientific) by applying a target home-made database with more than 400 polyphenols. Retention time, accurate mass measurements, isotopic pattern fit and product ion scan spectra were used to identify and confirm the compounds when necessary. Finally, the most remarkable polyphenols

that allowed the classification were identified and selected to achieve the *R. Officinalis* characterization.

[1] A. Camprubi, I.A. Zárata, A. Adholeya, P. E. Lovato, C. Calvet, Land Degrad. Develop (2013) DOI: 10.1002/ldr.2229

[2] J. Saurina, Trends in Analytical Chemistry 29 (2010) 1027-1037

1^{er} Premio al mejor Póster (400 euros): comunicación P-30

EXPLORING POTENTIAL OF GAS CHROMATOGRAPHY WITH ATMOSPHERIC PRESSURE CHEMICAL IONIZATION AND TANDEM MASS SPECTROMETRY FOR SENSITIVE DETERMINATION OF ETHYL GLUCURONIDE IN HAIR

Tania Portolés^{(1)*}, Juliet Kinyua⁽²⁾, Alexander van Nuijs⁽²⁾, Delphine Cappelle⁽²⁾, Juan V. Sancho⁽¹⁾, Félix Hernández⁽¹⁾

⁽¹⁾ Research Institute for Pesticides and Water, University Jaume I, 12071 Castellón, Spain

⁽²⁾ Toxicological Centre, University of Antwerp, Universiteitsplein 1, 2610 Wilrijk, Belgium

* e-mail: tportole@uji.es

The detection and quantification of alcohol consumption is of significance in both forensic and clinical settings and can have a large impact on future legal actions and/or healthcare decisions. A few examples include the legal decisions made concerning the custody of children or the removal of a patient from the liver transplant list, among others [1].

Ethyl glucuronide (EtG) is a minor metabolite of ethanol that accumulates in hair and has proved to be a specific and sensitive long-term biomarker for the detection of chronic and excessive alcohol consumption. Due to the typical wide detection window of the hair matrix and the possibility of segmentation, the evaluation of alcohol consumption in different periods is feasible which constitutes a substantial advantage from routine methods in blood and urine [2].

The metabolization of ethanol to EtG represents approximately 0.05% of the total alcohol elimination and it is excreted mainly in urine providing EtG concentrations in the lower picogram range: >30 pg/mg hair in alcohol-dependent individuals, between 7 and 30 pg/mg hair for moderate alcohol consumers, and

<7 pg/mg hair for teetotalers. Sensitive analytical methods are thus required for the reliable determination of such low EtG concentrations.

The current methods offer limits of quantification (LOQs) varying between 2 and 5000 pg/mg with LOQs generally higher (>10 pg/mg hair) for liquid chromatography (LC) methods compared to gas chromatography (GC) methods (<10 pg/mg hair) being better by the use of negative ion chemical ionization (NICI) instead of electron impact (EI), mainly due to the high fragmentation degree of EtG in EI source.

The aim of this work is to explore the capabilities of the recently revived atmospheric pressure chemical ionization source (APCI) in combination with GC and triple quadrupole mass spectrometer for the sensitive quantification of EtG in hair samples after pentafluoropropionic anhydride (PFPA) derivatization. A higher sensitivity would allow a simpler and cheaper preparation step. Soft ionization of this source allowed to form $[M+H]^+$ as the base peak of APCI mass spectra, giving the possibility of selecting it as a precursor ion for MS/MS experiments. Matrix matched calibration curve in the range of 1 pg/mg to 250 pg/mg hair was injected in order to check matrix effects and estimate a LOQ and LOD. Obtained results have been compared with GC-NCI-MS/MS.

- [1] C.L. Crunelle, M. Yegles, A.L.N. van Nuijs, A. Covaci, et al., *Drug and alcohol depend.* 134 (2014) 1-11
 [2] D. Cappelle, H. Neels, M. Yegles, J. Paulus, A.L.N. van Nuijs, A. Covaci, et al, *Forensic Sci. Int.* 249 (2015) 20–24

2º Premio al mejor Póster (300 euros): comunicación P-44

UHPLC-API-MS/MS FOR THE DETERMINATION OF POLYFLUORINATED COMPOUNDS

Juan Francisco Ayala Cabrera*, Francisco Javier Santos Vicente, Encarnación Moyano Morcillo
 Department of Analytical Chemistry, Univ. of Barcelona. Av. Diagonal 645, 08028-Barcelona, Spain
 * e-mail: jayalaca8@alumnes.ub.edu

Fluorotelomers are fluorocarbon-based oligomers partially saturated by fluoride ions which present hydrophilic groups (alcohol, sulfonamide and sulfona-

mido ethanol). The concern over these compounds has been increased because their widespread in consumer products and their facility to metabolize into the environmentally toxic and persistent perfluorinated carboxylic acid (PFOA) or sulfonates (PFOS) [1].

Gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS) is the analytical technique use to analyze fluorotelomers due to their volatile and neutral character, although electron ionization and chemical ionization show some sensitivity problems [2] when analyzing these compounds. Since PFOS and PFOA are ionic compounds, generally determined by liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometry (LC-MS/MS), it would be interesting to explore the possibility of analyzing fluorotelomers by LC-MS/MS, in order to make possible the simultaneous determination of the whole family compounds.

In this work, two UHPLC-MS/MS methods are developed using atmospheric pressure chemical ionization (APCI) and atmospheric pressure photoionization (APPI), since ESI was inefficient to ionize fluorotelomers. The UHPLC separation methods were carried out in a C18 column using different mobile phase gradients and the best mobile phase additives that favor the ionization in both APCI and APPI. From fragmentation studies the most intensive and characteristic product ions were selected for quantitative analysis and confirmation purposes when determining these compounds using MRM (multiple reaction monitoring) acquisition mode.

UHPLC-APPI-MS/MS with an acetonitrile-water gradient and post-column addition of toluene as dopant showed 5 times better limits of detection than UHPLC-APCI-MS/MS with a methanol-water gradient. Finally, the selective, sensitive and repetitive UHPLC-APPI-MS/MS method developed has been applied to the analysis of different water samples to evaluate their applicability for environmental monitoring purposes.

- [1] H. Fromme, S. Tittlemier, W. Völkel, M Wilhelm, D. Tardella, *Int. J. Hyg. Environ. Health* 213 (2009) 239-270.
 [2] W. M. Herdenson, E. J. Weber, E. Duirk, J. Washington, M. A. Smith, *J. Chromatogr. B* 846 (2007) 155-161.

Samples are complex. Separating them shouldn't be.

Every breakthrough starts with a challenge. We believe that challenge should be your science, not your instrument. The Thermo Scientific™ Vanquish™ UHPLC delivers better separations, more results, and easier interaction than ever before. In 2010 we embraced UHPLC as the standard for all of our liquid chromatography solutions, and we have designed the Vanquish UHPLC as the instrument to solve your chromatographic challenges and achieve that breakthrough.

Vanquish UHPLC System

• Discover more at thermoscientific.com/Vanquish



© 2014 Thermo Fisher Scientific Inc. All rights reserved. All trademarks are the property of Thermo Fisher Scientific and its subsidiaries.



Thermo Scientific™
Accucore™ Vanquish™ Columns
1.5 µm solid core particles for
unmatched resolution and throughput



Leading Separations for
Mass Spectrometry
Providing that extra level of
confidence with seamless integration



Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™
Chromatography Data System
Integrated mass spectrometry support for
single point LC-MS control

A new chapter

A comprehensive understanding of samples has been out of reach for GC-MS users for too long. The new Thermo Scientific™ Q Exactive™ GC Orbitrap GC-MS/MS system is about to change all of that. An exciting new chapter in GC-MS is here with the superior resolving power, mass accuracy and sensitivity that only Thermo Scientific™ Orbitrap™ technology can deliver.

in GC-MS

• [Learn more at thermoscientific.com/QExactiveGC](http://thermoscientific.com/QExactiveGC)



15ª ASAMBLEA GENERAL DE LA SECyTA

La 15ª Asamblea General de la SECyTA, que contó con la asistencia de 79 socios, se celebró el día 28 de octubre de 2015, a las 18:00 h, en el Paraninfo de la Universidad Jaume I (Av. de Vicent Sos Baynat, s/n. 12071 Castelló de la Plana) 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. Elecciones a la Junta de Gobierno
6. Ruegos y preguntas

Desarrollo de la sesión y acuerdos adoptados

En primer lugar, la Presidenta de la SECyTA (Dra. M^a José González) da la bienvenida a todos los asistentes y expresa su más sincero agradecimiento a los organizadores del congreso, Drs. Juan Vicente Sancho y Joaquim Beltrán, y a los miembros de los Comités Científico y Organizador de la XV Reunión Científica de la SECyTA que se ha celebrado de forma conjunta con la VII Reunión Nacional de la SEEM, 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 14ª Asamblea General de la SECyTA está colgada en la página web de la SECyTA desde noviembre de 2014, 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.

A continuación, la Presidenta adelanta el punto 5º del orden del día, "Elecciones de la Junta de Gobierno", de forma que se pueda realizar la votación durante el transcurso de la asamblea. La presidenta informa de los siguientes aspectos relacionados con el proceso electoral.

5. Elecciones a la Junta de Gobierno.

Los miembros de la Junta de Gobierno que cesan en sus cargos de acuerdo con los Estatutos de la Sociedad son: la Presidenta (M^a José González Carlos), una vicepresidenta (Elena Ibáñez Ezequiel), la Secretaria (Belén Gómara Moreno), 7 vocales (Begoña Jiménez Luque, Joan Grimalt Obrador, Joan Solé Ribalta, Fco. Javier Santos Vicente, María Luz Sanz Murias, José M^a Sanguenís y José Monge Cónsul) y, por renuncia para poder presentarse a un nuevo puesto, un vocal (Juan Vicente Sancho Llopis).

En la última Reunión de la Junta de Gobierno de la SECyTA celebrada el pasado 20 de febrero de 2015 en Castellón de la Plana se acordó el siguiente calendario para proceder a renovar los cargos señalados:

- 13 de julio de 2015: Envío de la convocatoria de elecciones por carta a los socios de la SECyTA. Inicio del período de presentación de candidaturas (la normativa dice 20-25 días hábiles)
- 14 de septiembre de 2015: Fecha límite de presentación de candidaturas
- 17 de septiembre de 2015: Comunicación a la Presidenta y a los miembros de la Junta de Gobierno de los candidatos presentados
- 21 de septiembre de 2015: Comunicación pública a los socios de la SECyTA de los candidatos presentados y de la normativa para emitir el voto por correo
- Inicio del período de votación por correo
- 23 de octubre de 2015: Fecha límite de aceptación de votos por correo
- 28 de octubre de 2015: Votación en la Asamblea General de la SECyTA (en el marco de la XV Reunión Científica en Castellón de la Plana)

Transcurrido los plazos establecidos, los miembros de la SECyTA que han presentado su candidatura a estas elecciones 2015 son los siguientes:

- Presidente: Dr. Fco. Javier Santos Vicente (Universidad de Barcelona)
- Vicepresidente: Dr. Joan Grimalt Obrador (Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua, CSIC)
- Secretario: Dr. Juan Vicente Sancho Llopis (Universidad Jaume I de Castellón)

Vocales:

Dra. Belén Gómara Moreno (Instituto de Química Orgánica General, CSIC)
 Dra. María José González Carlos (Instituto de Química Orgánica General, CSIC)
 Dra. Elena Ibáñez Ezequiel (Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, CSIC-UAM)
 Dra. Begoña Jiménez Luque (Instituto de Química Orgánica General, CSIC)
 Dra. Marta Lores Aguín (Universidad de Santiago de Compostela)
 D. José Monge Cónsul (Agilent Technologies Spain, S.L.)
 Dr. Francisco Javier Moreno Andújar (Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, CSIC-UAM)
 D. José María Sangenís (Leco Instrument, S.L., Madrid)

La presidenta informa de que la Junta de Gobierno avala todas las candidaturas presentadas.

Una vez comunicados a los asistentes de la asamblea los nombres de los candidatos presentados, se procede a la constitución de la Mesa Electoral, de acuerdo con la normativa de elecciones aprobada en Junta de Gobierno de 5 de julio de 2007, y que establece que la Mesa estará formada por el socio más antiguo y el más moderno que se encuentre presente en la Asamblea. La Mesa Electoral queda constituida por el Dr. José Carlos Diez Masa (nº socio 23) y Dña. Daniela Salas Acosta (nº socia 1796), quienes se encargarán de presidir la votación. Para agilizar el proceso de votación, se facilitó a los socios asistentes a la Asamblea papeletas con el nombre de los candidatos para poder emitir el voto. La Secretaria entrega a la Mesa Electoral el Censo de Socios, el Acta de Votación y los votos recibidos por correo y/o entregados personalmente a la Secretaria, de acuerdo con la normativa establecida en la convocatoria de elecciones. Con el fin de no alargar innecesariamente la Asamblea, se tratan el resto de puntos del Orden del día mientras se procede a la votación de los asistentes.

2. Informe de la Presidenta.

En su informe, la Presidenta trató los siguientes temas.

2.1. Celebración de la XV Reunión Científica de la SECyTA junto con la VII Reunión Nacional de la SEEM.

En esta ocasión la reunión de la SECyTA se ha celebrado de forma conjunta con la SEEM, pero guardando cada uno su identidad. Como siempre, se ha procurado hacer un programa lo más atractivo posible. Así mismo, se ha facilitado la asistencia conjunta a las reuniones de las 2 Sociedades, habiendo puesto una cuota de inscripción atractiva para todos los socios, lo que se ha traducido en que la mayoría de los asistentes lo han hecho a ambas reuniones. En conjunto, esta vez se ha contado con 9 conferenciantes invitados (5 conferencias plenarias y 4 keynotes), de los cuales 6 han sido de SECyTA. Todos los conferenciantes invitados son investigadores de reconocido prestigio internacional, que nos han contado o nos van a contar los aspectos más novedosos de las técnicas de separación y preparación de muestras. La Presidenta comenta que desde la reunión de Tarragona, donde celebramos la XII Reunión de la SECyTA, hace cuatro años, en el 2012, en el que contamos con 212 congresistas, el número de asistentes ha ido disminuyendo poco a poco, lo que se traduce en un número menor de inscripciones y contribuciones científicas. Esta disminución en el número de inscripciones (178 en la actualidad), que nada tiene que ver con la calidad científica de las reuniones, está directamente relacionada con la dramática situación que la comunidad científica está sufriendo con los recortes en los presupuestos dedicados a la investigación, que cada año son mayores. Cada vez tenemos menos dinero y menos estudiantes, por lo que la asistencia a las reuniones científicas, tan importante para nosotros, se ve muy comprometida.

En este punto, la Presidenta comenta que le gustaría conocer la opinión de la Asamblea para recabar ideas sobre cómo impulsar la asistencia a las reuniones y pide que durante el sexto punto del orden del día (Ruegos y preguntas) intervengan los socios para dar su opinión al respecto.

En cuanto al programa científico de la Reunión, la Presidenta hace constar que, haciendo caso de las peticiones que se realizaron durante la Asamblea de hace un año, se ha dado más protagonismo a los posters, dando más tiempo a las sesiones de posters e iniciando la nueva sección de "flash presentation", que según parece ha tenido una buena acogida y un gran éxito.

Por último, la Presidenta recuerda a los asistentes que se pueden enviar los trabajos presentados a la Reunión actual como artículos a publicar en un Volumen Virtual Especial de la revista *Journal of Chromatography A*, como se ha venido haciendo en los 3 años anteriores. Las instrucciones para el envío



AIR LIQUIDE

Creative Oxygen



Alphagaz CO₂ SFC, la oferta de Air Liquide para cromatografía de fluidos supercríticos.

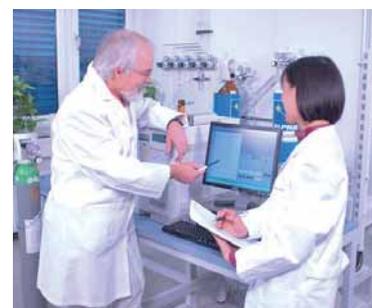
Air Liquide le ofrece a la industria farmacéutica la solución para sus necesidades de CO₂ líquido.

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 CO₂ SFC cumple con la farmacopea europea y se adapta a todos los equipos de SFC.

Confíe sus necesidades de CO₂ 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

de los artículos, así como la fecha límite están indicados en la página web del congreso. De todas formas Elsevier suele enviar un e-mail a todos los “corresponding authors” de las presentaciones.

2.2. Cierre de las 14^{as} Jornadas de Análisis Instrumental (JAI 2014, Barcelona)

Respecto a la celebración de las 14^{as} Jornadas de Análisis Instrumental, la Presidenta comenta que ya se ha cerrado el capítulo económico con Expoquimia y que, finalmente, Expoquimia cumplió con nuestras exigencias y nuestros requerimientos, algunos de los cuales (como el tema de las salas de las conferencias, las comidas tipo buffet y el escoger nosotros la secretaría técnica) se plantearon por nuestra parte como algo innegociable, y otras cuestiones como las cuotas, la ubicación de los posters, el número de azafatas, etc. constituyeron un tema de negociación en los que en algunos casos conseguimos lo que queríamos pero otros no.

Desde el punto de vista científico, las Jornadas fueron un éxito. Este éxito vino determinado por varios aspectos, entre los que podríamos destacar: el enorme prestigio de los conferenciantes invitados y un número importante de comunicaciones científicas, tanto orales como posters, lo que configuró un programa científico atractivo, competitivo y suculento.

En esta última edición de las JAI hubo casi 300 congresistas, de los cuales el 40% fueron jóvenes investigadores. El número de comunicaciones científicas totales fue de 250, de las cuales 52 fueron presentaciones orales. La mayoría de los asistentes eran científicos cuyas áreas de conocimiento estaban relacionadas con el desarrollo de técnicas y análisis instrumental y sus aplicaciones a diferentes campos de investigación.

Por último, la Presidenta recuerda que el año pasado, durante la Asamblea, ya comentó que le hubiera gustado 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 la Expoquimia. Como ya comentó hubo una participación de socios SECyTA en las JAI 2014 sensiblemente inferior a la asistencia a las Reuniones SECyTA que no son JAI, acentuándose durante las JAI ese descenso de inscripciones del que ya se ha hablado. La Presidenta manifiesta su preocupación sobre si existe una causa adicional a las penurias económicas que estamos sufriendo en la investigación los últimos años que haga que la disminución de asistentes a las JAI sea aún mayor de la esperada. Por su parte, la Presidenta

apunta también al hecho de que la Expoquimia en su contexto actual no es tan atractiva para la comunidad científica como lo era en ediciones anteriores. Además la ubicación de la Expoquimia en el entorno actual la hace también considerablemente menos atractiva que antes. Así mismo, la Presidenta recuerda que, por parte de las Sociedades implicadas, principalmente SEQA y SECyTA, estábamos dispuestas a entablar un diálogo con Expoquimia para cambiar el modelo actual de colaboración con Fira. Sin embargo, la voz cantante en estas conversaciones la debería llevar SEQA que es la Sociedad encargada de organizar las JAI 2017. En este sentido, la Presidenta informa de que al poco tiempo de terminar las JAI 2014, se mantuvo alguna reunión con la SEQA para iniciar el tema, pero llegó un momento en que las gestiones se paralizaron.

2.3. Informe sobre el Boletín

La presidenta informa de que la Dra. M^a Luz Sanz, una de las editoras del Boletín, no ha podido asistir a la asamblea por estar de baja por maternidad, por lo que en el aparatado de ruegos y preguntas dará la palabra a la Secretaria para transmitir la información relevante referente al Boletín de la SECyTA.

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

La Presidenta informa de que la XI Edición de los Premios José Antonio García Domínguez se ha convocado como se ha venido haciendo en las dos últimas ediciones, pidiendo en el momento del envío del abstract que se señalara en la casilla correspondiente si se quería optar al premio. Así mismo, recuerda a los candidatos que es conveniente que se lean los requisitos establecidos para optar a premio con el fin de agilizar los trámites. La Presidenta comunica que el jurado encargado de fallar dichos premios se ha escogido preferentemente entre los miembros del Comité Científico y Organizador y que el acto de entrega de los mismos tendrá lugar el viernes 3 de octubre durante la clausura del congreso.

2.5. Celebración de próximos congresos

La Presidenta anuncia a los asistentes la celebración de la próxima Reunión Científica de la SECyTA (XVI Reunión de la SECyTA, XLV GCTA) en Sevilla en noviembre de 2016. La Reunión estará organizada por los Drs. José Antonio González Pérez y Francisco José González Vila, del Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología de Sevilla (IRNASE) del

CSIC. El Dr. José Antonio González hará una breve presentación en unos momentos, después de los informes de la Secretaria y el Tesorero.

La presidenta recuerda que falta un año para el evento y la importancia que tienen las reuniones de la SECyTA, tanto desde el punto de vista científico como de reconocimiento y proyección internacional de la Sociedad. Por ello, la Presidenta solicita ayuda e implicación no sólo de los miembros de la Junta de Gobierno sino también de todos los socios para que la próxima reunión sea un éxito.

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 02 de octubre de 2014 en Barcelona, hasta hoy, 28 de octubre de 2015, se han recibido un total de 23 altas y 26 bajas. En el listado actual de Secretaría el número de socios a día de la celebración de esta Asamblea es de 500 socios.

El número de altas ha descendido respecto a otros años, pero también las bajas, por lo que el número total de socios se mantiene prácticamente constante. De las 26 bajas, 18 corresponden a bajas solicitadas por los socios, 4 son estatutarias (debido a que el socio en cuestión lleva tres impagos consecutivos) y 4 a jubilaciones. Hay que destacar que el número de bajas estatutarias se ha reducido considerablemente porque se hace un seguimiento mucho más exhaustivo y personalizado de los impagos anualmente.

3.2. Ayudas concedidas por la SECyTA.

Se han concedido un total de 5 ayudas (de 500 € cada una) para la asistencia a congresos internacionales, distribuidos de la siguiente forma:

- 1 ayuda para la asistencia al 14th International Conference on Environmental Science and Technology (CEST 2015) celebrado en Rodas (Grecia) de 3 al 5 de septiembre de 2015.
- 3 ayudas para la asistencia al 18th European Conference on Analytical Chemistry (EuroAnalysis 2015) celebrado en Burdeos (Francia) del 6 al 10 de septiembre de 2015.

- 1 ayuda para la asistencia al 4th International Conference on Foodomics (Foodomics 2015) celebrado en Cesena (Italia) del 8 al 9 de octubre de 2015.

En el caso de la presente Reunión, la Sociedad ha concedido un total de 27 becas de inscripción tanto a la XV Reunión Científica de la SECyTA como de inscripción combinada SECyTA+SEEM (que han supuesto un total de 6.750 €) y 23 ayudas de viaje (4.025 €) a jóvenes investigadores socios de la SECyTA que se desplazasen desde fuera de Castellón.

3.3. Colaboración de la SECyTA con otros congresos.

La SECyTA colaboró en la celebración de la SETAC Europe 25th Annual Meeting (SETAC 2015) celebrada en Barcelona del 3 al 7 de mayo. La colaboración consistía en la concesión de ayudas para la asistencia a dicho congreso, sin embargo, no se solicitó ninguna ayuda para este congreso.

Igualmente, la SECyTA colaboró con la celebración del 6th International Conference and Exhibition on Analytical & Bioanalytical Techniques (Analytica 2015) que se celebró en Valencia del 1 al 3 de septiembre ofreciendo ayudas de asistencia a congresos internacionales o patrocinados (a elección de los socios) y apareciendo el logo de la Sociedad como colaborador en la web del congreso, pero no se solicitó ninguna ayuda.

Del mismo modo, la SECyTA va a colaborar con la celebración del XVI Latin-American Congress on Chromatography (COLACRO 2016) y el 9th National Meeting on Chromatography (9ENC) que se celebrará en Lisboa (Portugal) del 5 al 9 de enero de 2016, ofreciendo ayudas de asistencia a congresos internacionales o patrocinados (a elección de los socios) y apareciendo el logo de la Sociedad como sponsor en la web del congreso. Hasta el momento no se ha solicitado ninguna ayuda, pero todavía hay tiempo ya que el congreso se celebrará el año que viene.

Así mismo, la SECyTA va a colaborar con la celebración del 44th International Symposium on High Performance Liquid Phase Separation and Related Techniques (HPLC 2016) que se celebrará en San Francisco (EEUU) del 19 al 24 de junio de 2016, ofreciendo ayudas de asistencia a congresos internacionales o patrocinados (a elección de los socios) y apareciendo el logo de la Sociedad en la parte de "Travel Grants" en la web del congreso. Al igual que en el caso

anterior, hasta el momento no se ha solicitado ninguna ayuda, pero todavía hay tiempo ya que el congreso se celebrará el año que viene.

3.4. *Temas Generales.*

Este año, otras de las actividades realizadas desde la secretaría han sido: la aprobación en la reunión de la Junta de Gobierno (20 de febrero de 2015) de las nuevas bases para la XI Edición del Premio José Antonio García Domínguez (patrocinado por Bruker) y la tramitación y gestión de todo el proceso de elecciones para la renovación parcial de la Junta de Gobierno. Como ya se ha mencionado en el informe de la Presidenta, los cargos que se renuevan ahora en octubre de 2015 son:

Por cese estatutario: Presidente, 1 vicepresidente, Secretario y 7 vocales

Por renuncia (para presentarse a otro cargo): 1 vocal

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:

- 17 congresos internacionales:
 - 2º Congreso Iberoamericano de Ingeniería de los Alimentos (CIAL 2016); HPLC 2016; 26th Anniversary World Congress on Biosensors (BIOSENSORS 2016); XVI Latin-American Congress on Chromatography & 9ENC: 9th National Meeting on Chromatography (XVI COLACRO); 31st Montreux Symposium on LC-MS; RAFA 2015; 8º Congreso Argentino de Química Analítica; EURO FOOD CHEM 2015; 9th International Conference on Instrumental Methods of Analysis-Modern Trends and Applications (IMA 2015); XVIII EUROANALYSIS; Analytica 2015; ITP 2015 and 8th Nordic Separation Science (NoSSS) symposium; International Network of Environmental Forensics (INEF 2015); 24th International Conference on Ion Mobility Spectrometry (ISIMS 2015); 28th International Symposium on Preparative and Process Chromatography (PREP 2015); 4th International Symposium on Sensor Science (I3^s 2015); Iberoamerican Meeting on Ionic Liquids (IMIL 2015).

- 3 cursos de especialización
- 10 ofertas de contratos/becas
- 1 máster universitarios
- 1 red científica

3.6. *Próximos congresos.*

Como ya ha mencionado la Presidenta, la próxima Reunión Científica de la Sociedad se celebrará en Sevilla del 2 al 4 de noviembre 2016 siendo el chairman el Dr. José Antonio González-Pérez, el co-chairman el Dr. José M^a de la Rosa Arranz, y el chairman honorífico el Dr. Francisco J. González-Vila.

Finalmente, la secretaria se despide de esta su última asamblea en el cargo agradeciendo el apoyo de toda la Junta de Gobierno, especialmente a su predecesor, el Dr. Javier Santos, todo el apoyo prestado durante estos cuatro años, no sólo logístico, sino también el apoyo moral. Y deseando suerte y mucho ánimo a su sucesor, el Dr. Juan Vicente Sancho.

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 Barcelona el 02 de octubre de 2014 (del 01-10-2014 al 22-10-2015), indicando que el saldo es positivo.

Respecto al balance el Tesorero llama la atención sobre distintos puntos:

- En primer lugar quiere agradecer a las empresas su apoyo económico, tan importante para la Sociedad.
- Se puede observar un mayor importe en los gastos de la Junta respecto a otros años, y esto se debe a que al ser año de elecciones se han realizado dos mailings postales en lugar de uno, el primero en el que se anunciaban las elecciones y el segundo, anunciando las candidaturas.
- En cuanto a la web, este año se ha hecho efectivo el pago de la segunda parte de la factura del diseño y puesta en marcha de la nueva web, que estaba pendiente.
- El balance de este periodo ha sido negativo, aunque los ingresos y los gastos siguen siendo similares, debido a que los ingresos de Fira para las JAI se registraron en 2014 mientras que el pago a la secretaría técnica se ha realizado en 2015.

A continuación, el Tesorero presenta el balance económico de las 14^{as} Jornadas de Análisis Instrumental (JAI 2014) celebradas en Barcelona.

Destacar que se han cerrado las JAI con un balance positivo de 9.966, 27 €, que no es del todo real ya que estos números están considerados incluyendo el IVA, que se declarará a final de año, con lo que quedaría un balance aproximado de unos 3.000 €, lo que es excepcional en la organización de unas JAI.

El Tesorero informa de que, a día de hoy, toda la operativa bancaria es correcta. El número de impagos bancarios se ha reducido considerablemente, siendo sólo 11 en este año 2015.

A modo de pequeño balance de este periodo 2011-2015, el Tesorero comenta que el balance es positivo, por varios motivos: primero, el Boletín es ya autofinanciable, por la reducción de costes de impresión y los ingresos por publicidad. Segundo, la regularización para el cobro de las cuotas en el primer trimestre del año ha hecho que el control de los impagos sea más efectivo dentro del año en curso. Tercero, los congresos celebrados en este periodo han sido positivos o muy poco negativos. Aun así, el gasto de la Sociedad en becas y ayudas de viaje concedidas ha sido superior a 65.000 € estos 4 años.

6. Ruegos y preguntas

La Secretaria da la palabra al Dr. Javier Moreno, editor del Boletín, quien informa a los socios de que la iniciativa de publicar los resúmenes de las tesis defendidas ha sido un éxito, hasta tal punto que, por problemas de espacio en el Boletín, los resúmenes se irán publicando por grupos de 2-5 resúmenes en cada número (dependiendo del espacio disponible) según riguroso orden de recepción de los mismos. En este punto interviene la Dra. Cristina Soria (también editora del Boletín) para solicitar a los socios su colaboración en el mismo y recuerda que se puede participar enviando resúmenes y reseñas de artículos publicados (ambos remunerados) así como sobre asuntos de interés general dentro del campo de la cromatografía y técnicas afines. Desde el punto de vista del interés del Boletín y de su calidad cree que es muy importante que se diversifiquen los grupos que participan para que los artículos y reseñas publicados no sean siempre de los mismos grupos y temas de investigación.

El Dr. Joan Grimalt recuerda a los socios que la Editorial Elsevier acoge con muchas ganas los artículos de las reuniones de la SECyTA para publicar en el

Journal of Chromatography A por lo que anima a todos los socios a participar y a enviar a estos volúmenes especiales sus trabajos de investigación presentados en el congreso. La SECyTA lleva ya 20 años renovando esta colaboración y sería una pena perderla por falta de interés, por lo que es importante enviar un número considerable de artículos para mantenerla y que Elsevier siga interesada. Además, recuerda que en este tipo de volúmenes especiales, los editores suelen dar más voz a los autores a la hora de responder a las revisiones de los referees.

A este respecto, la Presidenta comenta que el volumen especial de las JAI 2014 sólo aparecieron 7 u 8 artículos, que es un número un poco bajo. Por lo que se une al Dr. Grimalt y anima a todos los socios a mandar artículos. Todos sabemos que el Journal of Chromatography A es una revista exigente pero hay que tener en cuenta que publicar estos volúmenes especiales de nuestros congresos, da caché a la Sociedad.

La Dra. Maite Galcerán interviene para hablar sobre la celebración de las JAI 2017. En su opinión, la SECyTA debe hacer una gestión proactiva ya que si dejamos el asunto en punto muerto nos encontraremos el año que viene con los plazos muy justos y con muy poco margen de maniobra para la organización de las mismas o para buscar alternativas.

Por otro lado, la Dra. Maite Galcerán hace una reflexión sobre las reuniones anuales de la SECyTA. Hoy en día hay una plétora ingente de reuniones científicas y todos los grupos de investigación van justos de personal. En el caso de la SECyTA, tenemos reunión todos los años, lo que, en una situación económica como la actual es duro de llevar. La Dra. Galcerán propone hacer reuniones cada dos años y el año intermedio hacer un workshop, una reunión de jóvenes investigadores o algo parecido, que durase sólo un día y que tuviese precios más económicos (buscando, por ejemplo, celebrarlos en una universidad para abaratar costes de sede).

En respuesta a la primera parte de la intervención de la Dra. Galcerán, la Presidenta contesta que desde la Junta de Gobierno de la SECyTA se van en poner en contacto con la presidenta de la SEQA para pedirle que defina su postura respecto a la celebración de las JAI 2017 en un plazo breve de tiempo. Si SEQA decide seguir adelante con ello, entonces habrá que ver y negociar cómo se plantea la colaboración de cara a la Fira y si SEQA dice que no quiere continuar con las

JAI, entonces SECyTA tendrá que decidir qué quiere hacer y cómo se gestionaría el asunto de cara a Fira.

En cuanto a la segunda parte de la intervención de la Dra. Galcerán, la Presidenta comenta que ese mismo aspecto se lo lleva planteando ella desde hace tiempo, pero como esta reunión de Castellón ha sido un éxito quizá también se podría plantear hacerlo anualmente pero de forma conjunta con otras Sociedades. En este mismo sentido, el Dr. Joan Grimalt interviene para comentar que está totalmente de acuerdo en que a la SECyTA le debe preocupar que no baje el número de asistentes, pero los 170 inscritos de esta reunión demuestran que, este tipo de reunión, ha sido un éxito. Por ello, al igual que ha comentado la Presidenta, opina que quizá la línea de actuación sea hacer reuniones conjuntas en lugar de pasar a una bianual o intentar fusionar nuestras reuniones con congresos internacionales como se hizo en Valencia con el ISC. Quizá sería buena idea probar a dar un toque internacional a la reunión de Sevilla a ver qué tal funciona. Según su opinión, el Dr. Grimalt cree que de momento podemos seguir manteniendo reuniones anuales porque parece que hasta ahora nos vamos manteniendo bien. En esta misma línea, el Dr. Ramis Ramos interviene comentando que los argumentos del Dr. Grimalt le parecen perfectos y que “cuando una cosa va bien, mejor no tocarla”. Sin embargo, según su opinión, no terminamos de ir bien. Por lo que propone, alternar unos años de congresos presenciales con otros años de congresos virtuales que es un formato muy interesante si se encuentra a alguien que lo organice adecuadamente.

Cambiando de tema, la Secretaria interviene para preguntar a los socios más jóvenes que les han parecido las sesiones de “flash presentation”. D. Juan Francisco Ayala contesta que en su opinión el resultado ha sido muy bien y la organización de las mismas ha estado muy bien porque se les ha avisado con tiempo para poder preparar la presentación. La Dra. Galcerán comenta que a ella le ha gustado el formato pero le ha resultado un poco raro ver a algunos seniors dar este tipo de comunicaciones. La Dra. Mercedes de Frutos comenta que a ella le ha gustado mucho ya que se ha potenciado la visibilidad de los posters y las presentaciones han estado muy bien, también gracias a la ayuda de los moderadores, ajustándose todos a los tiempos y haciendo esas sesiones muy dinámicas. Por su parte, a ella no le ha parecido raro ver a seniors dar este tipo de comunicaciones ya que así la importancia se le da a la temática y la calidad del póster y no a que tenga que presentarlo obligatoriamente un estudiante.

Por otro lado, la Dra. de Frutos agradece a los editores del Boletín el gran trabajo que hacen y agradece a la Secretaria de la SECyTA los mails informativos que envía a los socios y pide a los estudiantes que terminan su periodo predoctoral que sean solidarios y se mantengan como socios durante un tiempo para poder ayudar a que próximos estudiantes pueda recibir becas igual que ellos se han estado beneficiando de las mismas durante unos años. En este sentido, la Secretaria comenta que cree que es muy interesante para los estudiantes mantener una vinculación con la Sociedad porque es cierto que en el último año se han transmitido a través de la secretaría bastantes ofertas de trabajo muy dirigidas a los perfiles de los socios y, particularmente, ella conoce a personas que después de haber recibido esta información “privilegiada” desde la SECyTA han podido participar en los procesos de selección de dichas ofertas de empleo. Por ello, cree, al igual que la Dra. de Frutos, que sería interesante que los socios más jóvenes mantengan su relación con la Sociedad durante un período de tiempo razonables después de leer la tesis ya que esto les puede ayudar a encontrar un posible trabajo. En relación con la difusión de ofertas de empleo, D. José M^a Sangenís pregunta si se podría dar difusión a unas ofertas que le han llegado a él de la Sociedad de Proteómica de Francia a lo que la Secretaria contesta que lo mejor es que les pregunte primero a ellos para que le den permiso para hacer la difusión desde la secretaría de la SECyTA.

La Dra. Ana M^a García-Campaña retoma el tema de las presentaciones “flash” en cuanto a si es conveniente o no que sean impartidas por seniors (como fue su caso). En su opinión, cree que puede haber una solución intermedia que pase por organizar una sesión de “flash presentation” para jóvenes investigadores y otra en general que dé cabida a todos aquellos trabajos que puedan ser interesantes aunque no sean presentados por un estudiante, como indicaba la Dra. de Frutos. En otro orden de cosas, la Secretaria interviene para pedir a los socios que hagan una labor proactiva en la captación de nuevos socios, por ejemplo, animando a grupos que conozcan que no participan en la Sociedad pero que investigan en temáticas muy relacionadas con la misma. Aprovechando esta intervención, la Dra. Encarna Moyano interviene para animar a los socios que son de SECyTA pero no de SEEM a que se den de alta en dicha Sociedad. A lo que la Secretaria se une comentando que considera ambas Sociedades muy complementarias y afines.

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

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

- Votos emitidos totales: 96 (79 votos en sala y 17 recibidos por correo)
- Votos nulos: 1
- Votos emitidos válidos: 95

El reparto de los votos emitidos ha sido el siguiente:

Cargo	Candidato/a	Votos
Presidente	Dr. Fco. Javier Santos Vicente	91
Vicepresidente	Dr. Joan Grimalt Obrador	89
Secretario	Dr. Juan Vicente Sancho Llopis	90
Vocales	Dra. Belén Gómara Moreno	92
	Dra. M ^a José González Carlos	90
	Dra. Elena Ibáñez Ezequiel	85
	Dra. Begoña Jiménez Luque	83
	Dra. Marta Lores Aguíñ	91
	D. José Monge Cónsul	88
	Dr. Fco. Javier Moreno Andújar	90
	D. José M ^a Sangenis	77

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

- Presidente: Fco. Javier Santos Vicente
(Universidad de Barcelona, Barcelona)
- Vicepresidente: Joan Grimalt Obrador
(Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua, CSIC, Barcelona)
- Yolanda Picó García
(Universidad de Valencia)
- Secretario: Juan Vicente Sancho Llopis
(Universitat Jaume I, Castellón)
- Tesorero: Jordi Díaz Ferrero
(Instituto Químico de Sarriá, Universitat Ramon Llull, Barcelona)

- Vocales:
- Ana María García Campaña
(Universidad de Granada)
- Belén Gómara Moreno
(Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)
- María José González Carlos
(Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)
- Elena Ibáñez Ezequiel
(Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, CSIC, Madrid)
- Begoña Jiménez Luque
(Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid)
- Marta Lores Aguíñ
(Universidad de Santiago de Compostela)
- José Monge Cónsul
(Agilent Technologies Spain, S.L., Barcelona)
- Francisco Javier Moreno Andújar
(Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, CSIC-UAM)
- Miguel Ángel Pérez Alonso
(Bruker Española, S.A.)
- José M^a Sangenis
(Leco Instrument, S.L.)

La Presidenta agradece el trabajo realizado por la Mesa Electoral en el proceso de votación. Así mismo agradece a todos los socios de la SECyTA la elevada participación en estas elecciones. También da las gracias a los miembros salientes de la Junta por el trabajo realizado en los últimos años y da la bienvenida a los nuevos.

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 15^a Asamblea General de la SECyTA a las 19:45 h. del citado día.



Belén Gómara Moreno
Secretaria de la SECyTA

JUNTA DE GOBIERNO DE LA SECyTA (2015)

En la pasada 15ª Asamblea General de la SECyTA, celebrada el 28 de octubre de 2015 se procedió a la renovación de parte de la Junta de Gobierno de la SECyTA, quedando constituida como se muestra a continuación:



Juan O. Grimalt Obrador
Vicepresidente



Fco. Javier Santos Vicente
Presidente



Yolanda Picó García
Vicepresidenta



Juan Vicente Sancho Llopis
Secretario



Jordi Díaz Ferrero
Tesorero



María José González Carlos
Vocal



Elena Ibáñez Ezequiel
Vocal



José Monge Cónsul
Vocal



Ana M. García Campaña
Vocal



Belén Gómara Moreno
Vocal



Marta Lores Aguín
Vocal



Miguel Ángel Pérez Alonso
Vocal



Fco. Javier Moreno Andújar
Vocal



Begoña Jiménez Luque
Vocal



José Mª Sangenis Magraso
Vocal

NUEVOS SOCIOS DE LA SECyTA

1784

Bade, Richard
Instituto Universitario de Plaguicidas y Aguas
Universidad Jaume I
Av. Vicent Sos Baynat, s/n
12071 Castellón de la Plana (Castellón)

1785

Lakade, Sameer
Departamento de Química Analítica y Química
Orgánica
Universidad Rovira i Virgili
Campus de Sescelades
Carrer Marcel·lí Domingo, s/n
43007 Tarragona

1786

Andreu Ribó, María
C/ Major, 11 1º 1ª
43400 Montblanc (Tarragona)

1789

Ccancapa Cartagena, Alexander David
Universidad de Valencia
Av. Vicent Andrés Estellés, s/n
46100 Burjassot (Valencia)

1790

Itchart Roca, Cristina
Av. Montevideo, 116 Casa nº 10
08340 Vilassar de Mar (Barcelona)

1791

Lacalle Bergeron, María Leticia
Viver, 22
12560 Benicassim (Castellón)

1792

Pérez Míguez, Raquel
Edificio Polivalente. Laboratorio 213
Universidad de Alcalá
Carretera Madrid-Barcelona km 33,600
28871 Alcalá de Henares (Madrid)

1793

Moya-Angeler Villaverde, Casandra
Cocuy, 1. Piso 5 Puerta 4
28033 Madrid

1794

Sabater Sánchez, Carlos
Risco del Pájaro, 14
28002 Madrid

1795

Roig i Navarro, Antoni Francesc
Universitat Jaume I
Institut Universitari de Plaguicides i Aigües (IUPA)
Edifici Investigació I
Avenida Sos Baynat, s/n
12071 Castelló de la Plana (Castelló)

1796

Salas Acosta, Daniela
Departamento de Química Analítica y Química Orgánica
Faculta de Química. Edificio N4
Campus Sescelades. Universidad Rovira i Virgili
Marcel·lí Domingo s/n
47003 Tarragona

1798

Ezquer Garin, Carlos
Plaza de Manises, 3
46003 Valencia

PREMIOS A SOCIOS



El pasado 30 de noviembre de 2015 **Guillermo Reglero Rada** ha sido premiado con la Medalla de Honor al Fomento de la Invención de la fundación García-Cabrerizo en reconocimiento a sus innovadoras contribuciones en el campo de la Ciencia y Tecnología de Alimentos.

Guillermo es Doctor en Ciencias Químicas por la Universidad Autónoma de Madrid (1985), Catedrático de Ciencias de la Alimentación de la Universidad Autónoma de Madrid (1999) e Investigador Científico del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (en excedencia). Inició su carrera investigadora en el Instituto de Fermentaciones Industriales del CSIC, donde adquirió una sólida formación en técnicas cromatográficas, avalada por sus numerosas publicaciones relacionadas con el desarrollo de métodos de análisis de alimentos e ingredientes alimentarios, así como en el control de procesos. Además, participó fructíferamente en la redacción del Boletín del GCTA desde 1983 a 1990, dándole un gran impulso mediante cambios de formato, creación de nuevas secciones y promovió las relaciones con las empresas a través de una intensa actividad personal, que contribuyó a mejorar enormemente el nivel de la revista.

Su amplio conocimiento en el desarrollo de metodología cromatográfica facilitó su posterior labor investigadora en el campo de la extracción con fluidos supercríticos de compuestos bioactivos procedentes de fuentes vegetales, así como en su caracterización química. El jurado encargado de otorgar el premio destacó, entre otros méritos, los estudios realizados sobre las propiedades funcionales (antiinflamatorias, antiolesterolémicas, antimicrobianas, antivirales o cardioprotectoras) de los diversos extractos vegetales obteni-

dos y su posible utilización en alimentos, así como la creación de patentes asociadas al pronóstico del cáncer y a extractos naturales para atenuar la menopausia.

Además de su dilatada actividad investigadora y docente, merecen mención los puestos de gestión desempeñados, entre los que destacan su labor como Técnico de Proyectos Industriales en el Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI, 1993-1994), Gestor del Área de Ciencia y Tecnología de Alimentos del Plan Nacional de I+D+I (2002-2006) y miembro de la Comisión Rectora del Instituto Mixto UAM-CSIC de investigación en Ciencias de la Alimentación (2005-2010). En la actualidad es Director del Instituto IMDEA-Alimentación.

El Profesor Reglero es autor de más de 200 publicaciones de impacto internacional y de 2 patentes en explotación. En 2001 recibió el Premio Archer Daniels otorgado por la American Oil Chemists Society y, en 2008, el Premio de la Sociedad Española de Gastronomía al Mejor Investigador en Ciencias de la Alimentación.

Agustín Olano Villén
CIAL (CSIC-UAM)



CONGRESOS CELEBRADOS

EUROANALYSIS 2015

Bordeaux, France, 7th-10th of September 2015

EUROANALYSIS has been successfully held every three years in the period 1972–1996 and every two years since 1996. It currently represents the European Conference in Analytical Chemistry, providing a forum for analytical chemists. The most recent meetings have taken place in Warsaw (2013), Belgrade (2011), and Innsbruck (2009).

This year, EUROANALYSIS has achieved its eighteenth edition in Bordeaux, France, bringing together hundreds of participants who not only belong to the European framework but also fellow scientists coming from the five continents. The European Conference in Analytical Chemistry was located at the Congress Center of Bordeaux (Bordeaux-Lac), from 7th to 10th September 2015. This scientific event has come back to France after approximately 40 years, under the organization of the “Société Chimique de France” (SCF), and the Division of Analytical Chemistry (DAC) of the European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS). The scientific committee was constituted by members of DAC EuCheMS chaired by Prof. Philippe Garrigues (University of Curdeauz, France) and Prof. Christian Rolando (University of Lille, France).

As a whole, the congress was organized in 32 different sessions, 4–5 of them taking simultaneously place, with a total of 160 oral communications and 563 poster presentations, resulting in an exciting scientific program.

This conference gave a particular relevance to the role of young researchers, who have actively participated in all the events. Indeed, there was a large number of communications, including oral communications and posters, presented by young researchers.

Plenary lectures were attended by recognized scientists in the Analytical Chemistry field such as: Philippe Darriet (Institute of Wine Sciences, Bordeaux, France), Miguel Valcárcel (University of Córdoba, Spain), Sergei G. Kazarian (Imperial College London, United Kingdom), Bernhard Lendl (Technische Universität Wien, Austria), Andrew Ewing (Chalmers

University and University of Gothenburg, Sweden), Christian Amatore (Sorbonne Universités, Paris, France), Catia Contado (University of Ferrara, Italy), Philippe Schmitt-Kopplin (Technische Universität Muenchen, Freising, Germany), Peter Schoenmakers (University of Amsterdam, The Netherlands), and Petra Dittrich (ETH Zurich, Switzerland).

The short courses took place on Sunday 6th September 2015, in the morning (from 9 am to 12 am) and in the afternoon (from 2 pm to 5 pm), including: “*Laser ablation/ICPMS for trace element and isotope ratio measurement: application to biomineral, petroleum industry and forensic science*” by Christophe Pécheyran (University of Pau, France); “*Chemo-metrics I: Exploratory data analysis*” and “*Chemo-metrics II: Calibration and classification*” by Federico Marini (University «La Sapienza», Rome, Italy); “*Speciation analyses for environmental, nutrition and industrial application*” by Olivier F.X. Donard (University of Pau, France); and “*How to improve the quality of separation? A comprehensive vision of operating parameters*” by Jérôme Randon (TechSep, Institut of Analytical Sciences, University of Claude Bernard Lyon 1, France).

After the short courses, the Registration and Opening Ceremony took place, introducing the scientific program.

Sessions on Monday included the following topics: spectroscopic analysis, bioanalysis, education on analytical chemistry (two sessions), polymer and bio-based materials, chemometrics, Raman spectroscopy, metabolomics, advances in electrochemistry, art and cultural heritage and AgriFood GPS project.

The second day of EUROANALYSIS congress started with lectures related to microbial biosensors, 3D printing as patterned platforms for biochemical analysis, inorganic, environmental and fuels analysis, forensics, clinical and drug analysis, together with analytical chemistry and environmental legislation.

Wednesday was focused on sample preparation and extraction, with sessions involving sample preparation, reference methods and materials, biosensors,

environmental analysis, separation sciences, food control, nano-object characterization, and wine analysis.

Poster sessions were exposed throughout the course of congress period. They could be visited during the breaks and at lunch time, having also assigned two specific hours on Tuesday afternoon.

In the main days of the conference, seminars offered by different commercial houses (Shimadzu and Chromatotec® group) could also be attended by participants.

The last day of EUROANALYSIS concluded with the Awards & Closing Ceremony, in which four participants in oral presentation and other four in poster presentation were awarded by different partners of the event (Shimadzu, University of Bordeaux, Société Chimique de France, EuCheMS, Sigma-Aldrich, Chromatotec® group, Merck and Springer). Finally, all participants were encouraged to attend next edition of this congress, EUROANALYSIS 2017, in Stockholm, Sweden.

The interesting scientific program of EUROANALYSIS was accompanied by several social events. The first day included the reception with “*Wine and Cheese Party*”, to enjoy the local gastronomy. The organizing committee surprised all the attendees with a photographic expo in downtown “*Musée d'Aquitaine*”. Moreover, it is worth highlighting the Gala Dinner celebrated at “*Chateau Giscours*” on Wednesday, where the attendees enjoyed local wine tasting.

Arturo A. Rincón-Rincón
Priscilla Rocío-Bautista
Providencia González-Hernández
QAAMA Group
Department of Chemistry, Analytical Division,
University of La Laguna, SPAIN

14th INTERNATIONAL CONFERENCE ON ENVIRONMENTAL SCIENCE AND TECHNOLOGY
 Rhodes, Greece, 3rd -7th of September 2015

The 14th edition of International Conference on Environmental Science and Technology (CEST 2015) took place in Rhodes (Greece) at Rodos Palace International Convention Centre, between 3rd to 5th September 2015. This biennial conference is supported

by the multi-disciplinary Global NEST (Network of Environmental Science and Technology), an international scientific movement focused on the new trends on environmental field with members from more than 65 countries. This edition has been organized by the Department of Mathematics and the Department of Environment of the University of the Aegean. The symposium offered five presentations of invited speakers of international renowned scientists, such as Dr. Polycarpos Falaras from NCSR “Demokritos” (Greece), Dr. Kathrin Fenner and Dr. Juliane Hollender from Eawag (Switzerland), Dr. Kevin Thomas from Norwegian Institute for Water Research and Dr. Vincenzo Belgiorno from University of Salerno (Italy).

The CEST 2015 meeting consisted in more than 30 different sessions presented in five parallel rooms, totaling 309 oral and 195 poster presentations. The conference sessions covered 19 scientific topics related to emerging environmental issues. Furthermore, several workshops were held in Rhodes, the most relevant was the 1st NORMAN workshop on analysis of problematic compounds based on how can we analyse very polar and hardly-ionisable compounds. The workshop took place before the conference, on 1st and 2nd of September 2015. Both HILIC and new ionisation techniques for non-polar compounds were discussed. The aims of this workshop was closely related to the “Emerging Pollutants” topic where trends in target and non-target screening methods were presented.

The “Emerging Pollutants” topic was treated during five different sessions and was the most related topic to chromatographic techniques. These sessions highlighted that liquid chromatography coupled to high resolution mass spectrometry (LC-HRMS) become the most powerful tool for the analysis of environmental pollutants. The capabilities of LC-HRMS for quantitative and qualitative purposes were showed in different presentations. As an example, Dr. Bletsou presented a target screening method for 2327 emerging pollutants through a database with molecular formula, accurate masses, retention times and fragment ions generated injecting authentic standards. Several presentations showed the importance of retention time prediction software for suspect and non-target analysis, where standards were not available. Furthermore several authors used both HILIC and Reverse Phase separations to obtain more information in order to elucidate or confirm compound identities. In addition, new retention time prediction models were presented.

Finally, the invited speaker Dr. Hollender showed the applicability of suspect and non-target screening to obtain a valuable record of historical persistent contamination in lake sediments.

Definitely, the conference offered a high quality scientific programme with presentations on the most recent advances also in other topics such as water supply and treatment, air pollution, solid waste management, hydrological modelling and climate change.

Jaume Aceña Sánchez

*Institute of Environmental Assessment
and Water Research (IDAEA-CSIC)*

4th INTERNATIONAL CONFERENCE ON FOODOMICS

Cesena, Italy, 8th -9th of October 2015

The '4th International Conference on Foodomics' was held from 8th to 9th October 2015 at the Teatro Verdi, located in the city of Cesena (Italy). The conference was chaired by Dr. Francesco Capozzi and Dr. Alessandra Bordoni, both from the Agricultural and Food Sciences Department at Bologna University, in cooperation with The Centre for Dissemination of the Results in Agricultural and Food Researches – Ce.D.R.A. The event was sponsored by the Fondazione Cassa di Risparmio di Cesena, and several companies, such as Orogel, Kamut and Ponti, and the Patronage of Expo Milano 2015.

As the name suggests, the conference was centered on the discipline of Foodomics, which is focused on the application of genomics, proteomics and metabolomics to study the relation or influence of the food in the human health and nutrition. In this 4th edition, the general trend of the conference was the exploration of new pathways for the objective substantiation with molecular evidences of health claims associated with food products, so the conference was divided according to three food groups, namely grains, dairy and herbs & spices, as representatives of the whole diet. A total amount of 21 oral communications including plenary lectures, keynote talks and selected oral communications, and 71 poster communications were distributed among these three sessions.

The conference opened in October 8th with the 'Grain' session, previously introduced with the plenary lecture entitled 'Nutrimetabolomics and nutritional biomarkers on the Mediterranean diet' by Dr. Cristina Andrés-Lacueva from the Nutrition and Food Science Department of the Pharmacy School at the University of Barcelona. It was followed by three oral communications and a keynote talk by Dr. Alessia Di Sandro about the 'Perspective of joint initiatives with UNIBO within the H2020 framework'. Finally, three selected oral communications were presented, and a total of 18 poster communications were exhibited in this session.

The second day, after the plenary lecture 'From food to health: the industry and scientific guides of the Pathway-27 project' by Dr. András Sebök from the Campden BRI Hungary Ltd., the 'Dairy' session was initiated. A total of 6 oral communications were subsequently presented and 6 poster communications were shown in this session.

After lunch time, the last session termed 'Herbs & Spices' followed the interesting plenary lecture 'FoodDB: A database of food constituents and their metabolic by-products', by David Wishart from the Departments of Biological Sciences and Computing Science at the University of Alberta, Canada. From a Foodomics point of view, this lecture was very informative because FoodDB database is the largest and most comprehensive resource in the world on food constituents, chemistry and biology. This session also accounted with six oral communications and 11 poster communications.

After the last communication, the conference was closed by the organizers, who kindly invited all attendees to the next edition of the conference to be held in the same city, Cesena (Italy), in 2017. In addition, the organizers announced the publication of two special issues in the Food Research International and the Genes & Nutrition journals dedicated to the Foodomics 2015. Finally, but not less important, it is worth highlighting the great quality of all the communications, the welcoming atmosphere of the location chosen for the conference, and the social dinner celebrated in the same building.

Alberto Valdés Tabernero

*Instituto de Investigación en Ciencias
de la Alimentación (CIAL-CSIC)*

CALENDARIO DE ACTIVIDADES

1. XVICOLACRO: XVI Latin-American Congress on Chromatography & 9ENC: 9th National Meeting on Chromatography

5-9 de Enero de 2016. Lisboa (Portugal)

Chair: J.M.F. Nogueira

University of Lisbon

<http://xvicolacro9enc.eventos.chemistry.pt/?setLn=en9enc@chemistry.pt>**2. Pittcon 2016. Conference & Exposition**

6-10 de Marzo de 2016. Atlanta, Georgia (EE.UU.)

info@pittcon.org

pittcon.org/

3. MSB 2016: 32nd International Symposium on Microscale Separations and Bioanalysis

3-7 de Abril de 2016. Niagara-on-the-Lake, Ontario (Canadá)

Chair: Philip Britz-McKibbin

McMaster University

www.msb2016.org/**4. SETAC Europe 2016: 26th Annual Meeting**

22-26 de Mayo de 2016. Nantes (Francia)

Co-chairs: Thierry Burgeot y Laurent Lagadic<http://nantes.setac.eu/?contentid=851>**5. BIOSENSORS 2016: 26th Anniversary World Congress on Biosensors**

25-27 de Mayo de 2016. Gotemburgo (Suecia)

Chair: Anthony P.F. Turner

Linköping University, Suecia

www.biosensors-congress.elsevier.com/**6. 40th International Symposium on Capillary Chromatography (ISCC) and the 13th GC×GC Symposium**

29 Mayo-3 Junio de 2016. Riva del Garda (Italia)

Chair: Prof. Luigi Mondello

Chromaleont Sl. Italia.

<http://192.167.108.132/slider.html>

iscc@chromaleont.it

7. HPLC 2016: 44th International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques

19-24 de Junio de 2016. San Francisco, CA (EE.UU.)

Chair: Robert T. Kennedy

University of Michigan (USA)

Contact: Ms Janet Cunningham

Barr Enterprises

www.hplc2016.org/index.html

janet@barrconferences.com

8. Metabolomics 2016: 12th Official Annual Meeting of the International Metabolomics Society

27-30 de Junio de 2016. Dublín (Irlanda)

http://metabolomics2016.org/Metabolomics_2016/Metabolomics_2016.html**9. 6th International Network of Environmental Forensics**

27-30 de Junio de 2016. Örebro (Suecia)

Organizing committee: I. Ericson, L. Sartz, M. Backström, H. Feidler

<http://www.inef2016.com/>**10. I3S 2015: 5th International Symposium on Sensor Science**

17-22 de Julio de 2016. Durham, NH (EE.UU.)

Chair: Prof. W. Rudolph Seitz

University of Hampshire

<http://sciforum.net/conference/I3S2016/>**11. PREP 2016: 29th International Symposium on Preparative and Process Chromatography**

17-20 de Julio de 2016. Philadelphia, PA (EE.UU.)

Chair: Giorgio Carta

University of Virginia

Ms. Janet Cunningham (PREP Symposium/
Exhibit Manager)www.Linkedin.com/in/BarrEnterprises

janet@barrconferences.com

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



NUEVAS TESIS DOCTORALES



“Desarrollo de métodos de análisis para la cuantificación de disruptores endocrinos químicos en muestras biológicas”

Autor: **Rocío Rodríguez Gómez**

Directores: A. Navalón Montón, A. Zafra Gómez, O. Ballesteros García

Universidad de Granada (Facultad de Ciencias)

21 de noviembre de 2014

Resumen:

La Tesis se ha centrado en el desarrollo de varias metodologías analíticas para la determinación de diferentes disruptores endocrinos químicos en leche materna humana. El estudio se ha centrado principalmente en la aplicación de diversas técnicas de tratamiento de muestra y limpieza de extractos (*clean-up*) previo al análisis mediante cromatografía de líquidos o de gases acopladas a espectrometría de masas en tándem. La selección de los compuestos objeto de estudio (bisfenol A y sus derivados clorados, parabenos y benzofenonas), se ha realizado en base a su producción mundial actual, alta exposición humana y, principalmente, a su demostrada actividad como disruptores endocrinos. Como matriz objeto de estudio, se seleccionó la leche humana en base a que es una de las vías de exposición más importantes en la actualidad del ser humano en las primeras etapas de la vida, donde se ha detectado una mayor vulnerabilidad de los organismos a estos compuestos químicos. Dada la complejidad de esta matriz, y las dificultades que ofrece para su estudio desde un punto de vista analítico, la investigación se ha centrado en la optimización y aplicación de diferentes técnicas de extracción y *clean-up*, con el objetivo final de proponer y validar diversos métodos multirresiduo de buenas características analíticas, que permitan la determinación de los compuestos seleccionados en muestras de leche materna. Como técnicas de análisis se emplearon tanto la cromatografía de líquidos de ultrarresolución (UHPLC) como la cromatografía de gases (GC) acopladas a espectrometría de masas en tándem. Los métodos que se han desarrollado aportan notables mejoras y representan una importante innovación en cuanto a metodología analítica, cubriendo un amplio rango de disruptores endocrinos. Todos los métodos han sido validados siguiendo las guías internacionales de aplicación.



“Improvements in Liquid Chromatography coupled to Mass Spectrometry methods for the determination of legislated and emerging marine toxins in the Northwest Mediterranean coast”

Autor: **María García-Altres Pérez**

Directores: Pablo de la Iglesia y Jorge Diogène

Universitat Rovira i Virgili (Facultad de Química)

27 de abril de 2015

Resumen

El objetivo de esta Tesis es mejorar la aplicación de métodos de cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas (LC-MS) para el estudio de toxinas lipofílicas y emergentes producidas por microalgas en un ecosistema litoral mediterráneo (Delta del Ebro, NO Mar Mediterráneo). El primer capítulo describe la evaluación de diferentes condiciones para implementar el método de control de referencia de toxinas lipofílicas en bivalvos, para mejorar el rendimiento del método y cumplir con los requerimientos legales. Este método se aplicó al estudio de una floración de *Dinophysis sacculus* en la bahía de Alfacs, considerando diferentes aproximaciones para caracterizar el riesgo: análisis de toxinas en microalgas, disueltas en agua, y en bivalvos. Los perfiles tóxicos de *D. sacculus* sólo presentaron ácido okadaico y pectenotoxina-2 (la más abundante). El contenido de toxina total por célula se incrementó hacia el final de la floración, coincidiendo con la máxima concentración de ácido okadaico en mejillones (hasta 3,7 veces el máximo permitido en Europa), la concentración de pectenotoxinas fue menor. Las ostras no acumularon toxinas por encima del nivel permitido. El método LC-MS permitió la detección de pinatoxina-g (primera detección en España) y espirólido-1 (toxinas emergentes), confirma-

das inequívocamente mediante MS de alta resolución, en concentraciones bajas en bivalvos y muestreadores pasivos. No se detectaron metabolitos acilados de pinatoxinas, y los falsos positivos se descartaron con información ortogonal. Las toxinas emergentes “palitoxinas” también se investigaron, y se descubrieron dos nuevas palitoxinas en cultivos de nuevas cepas de *Ostreopsis* cf. *ovata* de Cataluña: ovatoxina-g (46-dehidroxi ovatoxina-a) y un isómero de la palitoxina (anteriormente “palitoxina putativa”), igual que la palitoxina pero hidroxilada en C42 y entre el extremo A y C8, y dehidroxilada en C17 y probablemente en C64. Los perfiles toxínicos contenían ovatoxinas-a,-b,-c,-d y -e, con concentraciones por célula mayores que las de otras cepas mediterráneas.



“Desarrollo y aplicación de nuevas herramientas (bio)analíticas para el control de la seguridad de los productos cosméticos y de cuidado personal”

Autor: **Gerardo Álvarez Rivera**

Directoras: Marta Lores Agúin y María Llompart Vizoso
Universidad de Santiago de Compostela (Facultad de Química)
29 de junio de 2015

La presente Tesis Doctoral se centra en el control de la seguridad de los productos cosméticos con el objetivo de proporcionar herramientas analíticas que permitan solventar los inconvenientes de los métodos existentes para este fin y abordar las nuevas necesidades que han surgido en este ámbito. Para ello se proponen nuevas metodologías eficientes, selectivas y sensibles, basadas en técnicas avanzadas de extracción (MSPD, SPME y PLE) en combinación con técnicas cromatográficas (tanto LC como GC) acopladas a detectores de espectrometría de masas (MS y MS/MS). Estos desarrollos han permitido la determinación multicomponente de conservantes y fragancias alergénicas en una gran variedad de productos cosméticos y de cuidado personal de gran complejidad. Además, se ha explorado un enfoque novedoso para la detección rápida de microbiota contaminante en productos cosméticos, basado en el rastreo de compuestos orgánicos volátiles de origen microbiano (MVOCs) mediante HSSPME-GC-MS. Los resultados sugieren que es claramente factible la identificación cualitativa de microorganismos viables presentes entre la microbiota contaminante en este tipo de productos. Por último se ha abordado el estudio de la estabilidad fotoquímica de conservantes tanto en disolución acuosa como en el propio producto cosmético. El uso de distintas fibras de SPME, y la aplicación de una versión miniaturizada de la MSPD han permitido la identificación de diversos fotoproductos con una gran variedad de estructuras químicas. Los últimos experimentos realizados sobre un modelo de piel sintética han confirmado la formación de dos hidroxibenzofenonas y 2,8-DCDD, así como la generación de otros fotoproductos de tipo dioxina y derivados de BHT, algunos de ellos de toxicidad desconocida. Estos resultados suponen una destacable contribución al reciente llamamiento de instituciones públicas como la FDA (Food and Drug Administration) sobre la necesidad de investigar la formación de subproductos de fotodegradación potencialmente tóxicos, como la 2,8-DCDD, sobre la piel humana.



“Nuevos procedimientos de preparación de muestra y análisis cromatográfico para la determinación de productos de cuidado personal y contaminantes de interés prioritario”

Autor: **María Celeiro Montero**

Directoras: María Llompart Vizoso y Carmen García Jares
Universidad de Santiago de Compostela (Dpto. de Química Analítica, Nutrición y Bromatología)
30 de junio de 2015

El objetivo de esta Tesis Doctoral es el desarrollo de nueva metodología para el análisis de gran variedad de compuestos químicos de naturaleza muy diversa en distintos tipos de muestras. Los métodos propuestos se basan en técnicas de extracción que cumplan con los principios de “Química Verde” seguidos de cromatografía de gases-espectrometría de masas. Se ha dividido en tres Capítulos según los compuestos a estudiar. El Capítulo I se centra en la determinación de sus-

tancias potencialmente tóxicas en productos cosméticos y de cuidado personal. Para ello, se empleó como técnica de extracción una miniaturización de la dispersión de matriz en fase sólida (MSPD), lo que permitió la determinación simultánea de más de 70 compuestos de diversa naturaleza química, así como la extracción con líquidos presurizados (PLE) para el análisis de un producto de cuidado personal específico, como son las toallitas infantiles.

El Capítulo II se centra en el desarrollo de métodos para el análisis de fungicidas tanto en vino como en subproductos de vinificación. En este caso, se emplearon la microextracción-emulsificación asistida por ultrasonidos (USAEME), PLE y la extracción asistida por ultrasonidos (UAE). El Capítulo III se dedica al estudio de los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs). En este caso, se ha utilizado la microextracción en fase sólida (SPME) para demostrar la presencia de estos contaminantes prioritarios en superficies de caucho reciclado, empleadas como suelos de parques infantiles, así como en el aire y agua que se encuentran en contacto con las mismas y también se incluyó la optimización de las condiciones experimentales de SPME con vacío (Vac-SPME) con el objetivo de obtener la mayor eficacia de extracción para su aplicación al análisis de PAHs en aceite de oliva.



“Microstructured-Capillary Electrophoresis as novel frontier technology applied to the analysis of explosives and questioned documents”

Autor: **Matías Calcerrada Guerreiro**

Directores: Miguel González Herráez y Carmen García Ruiz

Universidad de Alcalá (Dpto. de Química Analítica, Química Física e Ingeniería Química)

10 de julio de 2015

Resumen:

Los principales objetivos de esta Tesis han sido: i) estudiar los principios fundamentales de la electroforesis con capilares microestructurados, una novedosa tecnología en la frontera del conocimiento basada en la sustitución del capilar habitualmente empleado en electroforesis capilar (CE) con nuevos materiales basados en fibras de cristal fotónico (PCFs) llamados capilares microestructurados (MSCs); y ii) aplicar la electroforesis con capilares microestructurados al análisis de muestras de interés forense tales como los explosivos y los documentos cuestionados. De acuerdo a estos dos objetivos principales, esta Tesis se ha dividido en dos partes, conteniendo cada una dos capítulos. La Parte I introduce al lector en el uso de PCFs en sensado químico, materiales a partir de los cuales los MSCs se diseñaron, y también demuestra el primer uso de estos materiales en equipos convencionales de CE. Por tanto, esta parte pone de manifiesto el uso de PCFs como materiales prometedores para el sensado químico estableciendo también la prueba de concepto de la electroforesis con capilares microestructurados. En la Parte II se explora el potencial de la electroforesis con capilares microestructurados a través del análisis de muestras de interés forense, en concreto, en explosivos y tintas presentes en documentos cuestionados. Sin embargo, dado que estas muestras poseen una naturaleza completamente distinta, sus estudios se han tratado de forma independiente. En primer lugar, se incluye una revisión donde se establece el estado del arte de la CE en el análisis de explosivos, para después mostrar la aplicabilidad de la electroforesis con capilares microestructurados en el análisis de algunos explosivos de base nitrada. En segundo lugar, se incluye una revisión en la que se muestra el estado del arte de la química analítica para el análisis de documentos cuestionados, incluyendo una gran variedad de técnicas analíticas, para finalmente mostrar los nuevos desarrollos de la CE convencional y con capilares microestructurados para el análisis de tintas en documentos cuestionados.



“Enzymatic synthesis of novel bioactive oligosaccharides via microbial transglycosidases acting on sucrose. Structural characterization and bioactivity study”

Autor: **Marina Díez Municio**

Directores: F. Javier Moreno y Miguel Herrero

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

15 de julio de 2015

Resumen:

La producción de nuevos oligosacáridos bioactivos suscita en la actualidad un gran interés debido a su posible uso como ingredientes funcionales en la industria alimentaria y farmacéutica. Entre las diversas estrategias empleadas para la producción de estos oligosacáridos, los procesos enzimáticos tienen un gran potencial, ya que normalmente presentan una alta especificidad por el sustrato, así como regio- y estereo-especificidad. En esta Tesis Doctoral se ha estudiado la obtención, vía síntesis enzimática, de varios carbohidratos que podrían presentar un potencial interés industrial, particularmente, en cuanto a su capacidad prebiótica. Asimismo, también se discute la caracterización estructural de los nuevos oligosacáridos sintetizados, llevada a cabo mediante resonancia magnética nuclear o espectrometría de masas. Por otra parte, una vez optimizada su síntesis, se procedió a la purificación de los compuestos de interés para posteriormente llevar a cabo estudios de bioactividad que permitan determinar fundamentalmente el potencial prebiótico de estos oligosacáridos. Tanto el conocimiento de la estructura de estos oligosacáridos como los estudios de bioactividad llevados a cabo, permitirán profundizar en un futuro en el conocimiento de la relación estructura-función, fundamental para el desarrollo y posible comercialización de estos nuevos ingredientes con potencial funcionalidad.



“Estrategias para mejorar la calidad de las separaciones en cromatografía líquida de fase inversa”

Autor: **Casandra Ortiz Bolsico**

Directores: M^a Celia García Álvarez-Coque, José Ramón Torres Lapasió y María José Ruíz Ángel

Universidad de Valencia (Facultad de Química)

17 de julio de 2015

La Tesis Doctoral propone estrategias dirigidas a mejorar la separación de mezclas que muestran una resolución cromatográfica extraordinariamente baja en las condiciones usuales de elución, mediante cromatografía líquida de fase inversa (RPLC). Los estudios se centraron, principalmente, sobre aspectos teóricos fundamentales, de interés general en RPLC, utilizando elución isocrática y en gradiente con columnas individuales o acopladas, relacionados con la predicción de las condiciones de elución, la modelización de picos cromatográficos y la investigación de los mecanismos de retención que existen en el interior de las columnas cromatográficas cuando se establecen equilibrios secundarios en presencia de diversos tipos de aditivos añadidos a las fases móviles (los surfactantes dodecilsulfato sódico y polioxietileno(23)lauril éter, líquidos iónicos derivados del 3-metilimidazolio, así como trietilamina y dimetiloctilamina). Deben resaltarse contribuciones novedosas sobre la correcta conexión de columnas en cromatografía líquida, y el desarrollo de herramientas cuantitativas para la predicción y optimización de cromatogramas cuando se utilizan columnas acopladas en elución isocrática y de gradiente. También, cabe destacar el desarrollo de gráficos que proporcionan información global sobre la retención y la cinética de las interacciones soluto-fase estacionaria en ambos modos de elución. Otras aportaciones se refieren a la propuesta de diversas metodologías para monitorizar la posible adsorción de un aditivo sobre la fase estacionaria, favorecer la inyección directa de muestras fisiológicas en una columna cromatográfica y la correcta medida de la supresión de la actividad de los grupos silanol en las columnas de base sílice mediante la adsorción de aditivos añadidos a la fase móvil.



“Desarrollo de un procedimiento de análisis para la determinación de siloxanos en biogás. Aplicación a depósitos controlados de residuos sólidos urbanos y estaciones depuradoras de aguas residuales”

Autor: **Maria Cristina Ribas Font**

Director: Francesc Broto Puig

Universitat Ramon Llull (IQS School of Engineering)

27 de julio de 2015

Resumen:

En las últimas décadas la población mundial ha tomado conciencia del cuidado del entorno generando la aparición de movimientos en favor de preservar el medio ambiente. Este compromiso social ha ido acompañado de políticas de gestión de residuos y búsqueda de energías alternativas que minimicen los efectos adversos. En este contexto surge también la oportunidad de aprovechar productos de desecho para producir energía eléctrica. La coincidencia de ambas tendencias, nuevas energías alternativas y gestión de los residuos, conduce al desarrollo de sistemas de producción de energía eléctrica utilizando biogás como combustible. El biogás, producto de alto poder calorífico, generado principalmente en depósitos controlados de residuos sólidos urbanos (RSU) y estaciones depuradoras de aguas residuales (EDAR), contiene también a nivel de trazas compuestos derivados del silicio (siloxanos) que dañan los sistemas de conversión de energía encareciendo los costes y las inversiones necesarias en las instalaciones.

En esta Tesis Doctoral se ha desarrollado un método analítico, utilizando cromatografía de gases de alta resolución acoplada a espectrometría de masas, que permite determinar el contenido en siloxanos del biogás generado en vertederos y depuradoras. Con este método analítico se han estudiado diferentes procedimientos de muestreo del biogás, seleccionando aquél más adecuado, sencillo y robusto.

Se han estudiado las ventajas que aportan los diversos sistemas de muestreo (bolsas, impingers y adsorbentes sólidos), así como diferentes columnas cromatográficas constituidas por distintas fases estacionarias y sus respectivas condiciones cromatográficas, hasta obtener el método óptimo de trabajo. Los mejores resultados se han obtenido combinando los tubos de carbón activo (etapa de muestreo) con una columna de polaridad intermedia (etapa de análisis). Este procedimiento permite analizar biogás procedente de depósitos de RSU y EDAR.

Posteriormente, con el procedimiento analítico desarrollado, se ha estudiado y monitorizado la concentración de siloxanos contenidos en el biogás generado en el depósito controlado de RSU de Orís a lo largo de diez meses. Estos estudios se han realizado en el marco de un Proyecto LIFE (“MICROPHILOX”) liderado por la empresa CESP A y de un Proyecto R+i Alliance (“SL1001”) liderado por la empresa CETaqua.



“Nuevos métodos de obtención y análisis de extractos vegetales enriquecidos en iminoazúcares bioactivos”

Autor: **Sonia Rodríguez Sánchez**

Directoras: María Luz Sanz y Ana Cristina Soria

Instituto de Química Orgánica General (CSIC)

25 de septiembre de 2015

La actividad inhibidora de glicosidasas hace de los iminoazúcares excelentes candidatos para el tratamiento de enfermedades relacionadas con la absorción de carbohidratos, como diabetes y obesidad. Existe también un gran interés por la obtención de estos compuestos, principalmente a partir de fuentes naturales, para su uso como ingredientes funcionales o complementos alimenticios. Sin embargo, las relativamente bajas concentraciones en matrices vegetales, la coextracción

de otros carbohidratos interferentes con su bioactividad y la gran variedad de iminoazúcares con similar estructura, hacen necesario el desarrollo de métodos avanzados de obtención y análisis de dichos extractos, siendo éste el objetivo principal de esta Tesis.

La extracción con disolventes presurizados (PLE) seguida del tratamiento con levaduras (*Saccharomyces cerevisiae*) permitió la obtención rápida, eficaz y limpia de extractos ricos en iminoazúcares. En cuanto al análisis, y con el fin de evaluar la complementariedad de los resultados obtenidos por ambas técnicas, se han desarrollado métodos por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) y por cromatografía líquida de interacciones hidrofílicas acoplada a espectrometría de masas tándem (HILIC-MS²) para el análisis simultáneo de iminoazúcares y otros carbohidratos de bajo peso molecular en extractos obtenidos a partir de morera, jacinto, Aglaonema y trigo sarraceno. La combinación de datos de retención y espectros de masas obtenidos por cada una de estas técnicas permitió la identificación de nuevos iminoazúcares en dichos extractos. Finalmente, y centrándonos en los extractos de Aglaonema, se ha demostrado su elevada actividad inhibitoria de α -glucosidasas, adecuada estabilidad térmica, y seguridad (baja toxicidad frente a células Caco-2), lo que evidencia lo prometedor de su empleo como fuente natural de ingredientes bioactivos.

Los resultados multidisciplinares descritos en esta Tesis suponen una contribución destacable en el campo del desarrollo de nuevos ingredientes bioactivos y complementos alimenticios, tema éste de gran repercusión tanto científica como económica.



“Evaluación del impacto ambiental asociado al uso de nuevos retardantes de llama”

Autor: **Enrique Barón González**

Directores: Ethel Eljarrat y Damià Barceló

Universidad de Barcelona (Facultad de Química)

16 de noviembre de 2015

Los retardantes de llama halogenados (HFRs) están presentes en un gran número de materiales y, debido a que su demanda anual aumenta año a año, entran continuamente en el medio ambiente, acumulándose en diferentes compartimentos ambientales. Pese a que algunos HFRs han sido prohibidos, otros alternativos han aparecido para substituirlos. La información sobre la presencia, comportamiento y efectos en el medio ambiente de estos compuestos es aún escasa. El objetivo de la presente Tesis es evaluar el impacto ambiental asociado al uso de estos nuevos HFRs. Se optimizaron 2 metodologías mediante GC-MS-MS con sensibilidad y selectividad adecuadas para el análisis de matrices ambientales. Se analizaron sedimentos procedentes de diferentes zonas, representando el primer estudio sobre los HNs en sedimentos de Europa, así como lodos de diferentes depuradoras españolas, encontrándose por primera vez el Dec 603 en esta matriz y mostrando que el DP es el HN mayoritario en lodos y sedimentos. También se analizaron muestras de especies de diferentes cadenas y posiciones tróficas. Se analizaron un total de 30 especies, detectándose los compuestos de interés en prácticamente todas, demostrando su presencia global y capacidad de bioacumulación. Las capacidades de bioacumulación y biomagnificación del Dec 602 fueron similares a las del BDE-47, mientras que para el Dec 603 y DP fueron más parecidas a las del BDE-209. En general, parece que se debería prestar más atención a los HNs, vista su presencia en una gran variedad de especies, y al Dec 602 en particular, debido a sus altas concentraciones en biota. Se observó también una acumulación específica de algunos compuestos en cerebro, y un descenso de las concentraciones de PBDEs en aves en la última década. Finalmente, se evaluó la toxicidad del DP y BDE-209, revelando que el DP parece tener más potencial genotóxico que su antecesor ya prohibido, el BDE-209.



EMPRESAS colaboradoras

PROTECTORAS

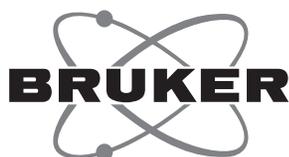
- **AGILENT TECHNOLOGIES SPAIN, S.L.**
Ctra. A-6, km 18,200
28230 LAS ROZAS
(Madrid)
- **BRUKER ESPAÑOLA, S.A.**
Avda. Marie Curie, 5, Edificio Alfa - Pta. Baja
Parque Empresarial Rivas Futura
28521 RIVAS-VACIAMADRID
(Madrid)
- **PERKIN ELMER ESPAÑA, S.L.**
Avda. de los Encuartes, 19
28760 TRES CANTOS
(Madrid)
- **TEKNOKROMA ANALÍTICA, S.A.**
Camí de Can Calders, 14
08173 SANT CUGAT DEL VALLÉS
(Barcelona)
- **THERMO FISHER SCIENTIFIC**
Avda. de la Vega, nº 1
Edificio 1 Planta 4
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, 79. 5ª Planta
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 SCIENTIFIC, S.L.U.**
Plaza de Europa 21-23
08908 L'HOSPITALET DE LLOBREGAT
(Barcelona)
- **LECO INSTRUMENTOS, S.L.**
Avda. de la Industria, 43
28760 TRES CANTOS (Madrid)
- **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
Tif.: 902 13 02 02
oferta@carburos.com
- **SUGELABOR**
Sicilia, 36
28038 MADRID



NOVEDADES TÉCNICAS



Bruker Chemical Analysis

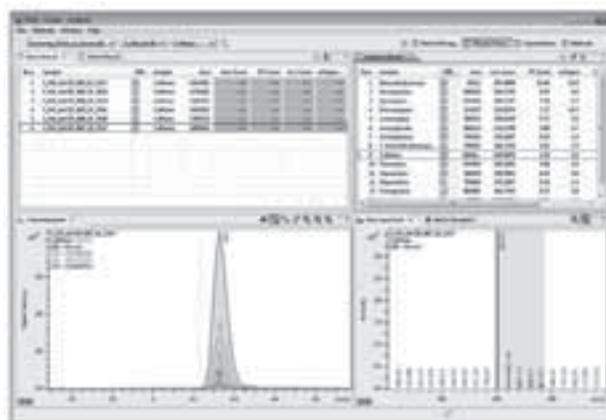
NUEVO SOFTWARE DE ANÁLISIS, CONFIRMACIÓN Y CUANTIFICACIÓN



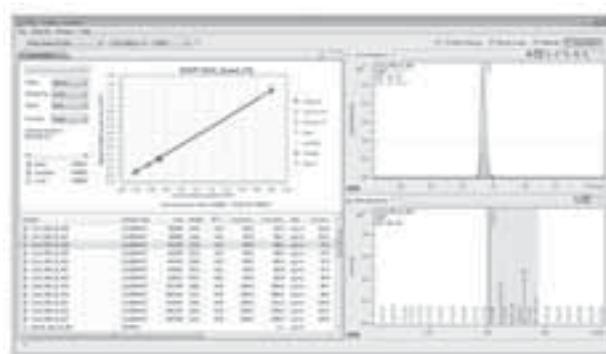
En nuestros días, cuando los espectrómetros de masas son capaces de adquirir más información en cada cromatograma y necesitamos extraer el máximo de información de cada minuto de análisis, el apoyo de herramientas de software de alta capacidad es un complemento imprescindible para la obtención de resultados.

Además de ser capaz de obtener el máximo de información sobre los datos adquiridos, vamos a exigir a nuestras herramientas de software un diseño intuitivo, atractivo y un concepto fácil de usar. Combinar todo ello en una única herramienta nunca ha sido fácil, pero Bruker ha dado un paso adelante muy importante con la presentación de la nueva generación de software de cuantificación, TASQ (Target Analysis Screening Quantitation). Una única plataforma de arquitectura cliente-servidor que ofrece las herramientas necesarias para el análisis de compuestos conocidos, su identificación y confirmación, y la cuantificación con curvas de calibración incorporadas, todo ello con un flujo de trabajo intuitivo y totalmente integrado.

Este software ha sido creado como una plataforma transversal entre distintas tecnologías orientada a la obtención eficaz de resultados analíticos en análisis de rutina medioambientales, toxicológicos o de seguridad alimentaria.



En una única pantalla combina información de identificación, confirmación y cuantificación cuando se dispone de las curvas de calibración correspondientes.



Ofrece múltiples opciones de presentación de resultados, por muestras o por analitos, en función de las necesidades de cada serie de muestras analizada, así como un amplio módulo de generación de informes de resultados, exportación a Excel o a LIMS y la integración en su sistema de gestión de muestras. Todo ello con un sencillo click de ratón.



Bruker Chemical Analysis

Bruker Española, S.A.
Parque Empresarial Rivas Futura
C/ Marie Curie, 5. Edificio Alfa
28521 Rivas-Vaciamadrid. Madrid - Spain
Tel.: 91 4994634 / 4080 - Fax: 91 656 62 37
Info-bcad-spain@bruker.com

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



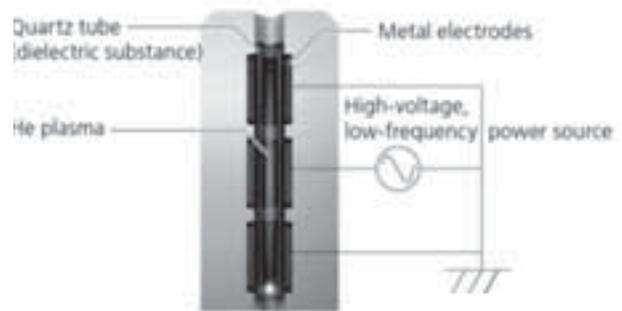
ANÁLISIS DE RESIDUOS DE GASES REFRIGERANTES MEDIANTE CROMATOGRFÍA DE GASES CON EL NUEVO DETECTOR BID (BARRIER DISCHARGE IONIZATION DETECTOR) DE SHIMADZU. APLICACIÓN AL R404A

Los gases refrigerantes son los responsables del funcionamiento del ciclo de refrigeración de un equipo de aire acondicionado, reduciendo o manteniendo la temperatura de un espacio determinado por debajo de la temperatura del entorno.

La legislación prohíbe el uso de CFCs (clorofluorocarbonos) y de HCFCs (hidroclorofluorocarbonos), lo que ha dado lugar a la sustitución de estos gases por los denominados “refrigerantes verdes”, entre los que se encuentran los gases R-407C, el R-134A y el R-404A, refrigerantes de gases fluorados (HFCs) exentos del cloro.

Los residuos de los gases refrigerantes deben ser gestionados como residuos peligrosos por un gestor autorizado según la normativa (Ley 22/2011, Orden MAM 304/2002).

La empresa Adiego Hnos. S.A., el primer gestor de este tipo de residuos en Aragón, analiza y certifica la composición de los residuos mediante cromatografía de gases usando un detector de plasma BID de última generación de Shimadzu, comercializado en España por Izasa Scientific.

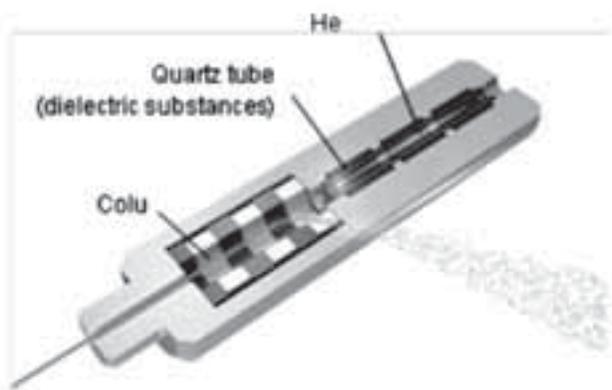


Una vez analizado el residuo de gas, Adiego Hnos. S.A. emite un certificado en el que acredita la composición del gas recibido y de este modo el productor del residuo puede solicitar la devolución del impuesto verde, impuesto que grava los gases fluorados.

La determinación de la composición combinada con otros procedimientos técnicos permite además al gestor regenerar de una manera eficiente los residuos de gases refrigerantes hasta conseguir cumplir las especificaciones de calidad que marca la norma AHRI 700, estándar que especifica los niveles aceptables de los contaminantes (requisito de pureza) para refrigerantes fluorocarbonados.

La analítica de estos refrigerantes se realiza por cromatografía de gases utilizando el modelo de cromatógrafo Shimadzu GC-2010 Plus Tracera. Este equipo es de aplicación en numerosos tipos de análisis en los que se demanda una alta sensibilidad y versatilidad, incorporando una novedosa técnica de detección por plasma de Helio.

En este tipo de detector BID de última generación de Shimadzu, el plasma se genera dentro de un tubo de cuarzo. Como resultado, el electrodo detector no se degrada y se garantiza la estabilidad analítica a largo plazo, requisito indispensable para la obtención de una certificación.



La empresa Adiego Hnos. S.A., en colaboración con Izasa Scientific, ha diseñado un procedimiento específico para analizar gases refrigerantes provenientes de la gestión de residuos. Sin embargo, existe la problemática del desconocimiento de la composición en la muestra a analizar, ya que un residuo de gas refrigerante puede contener infinitas combinaciones de gases y en infinitas proporciones. Esto obliga en primer lugar a calibrar el equipo realizando para ello diversas mezclas de composiciones diferentes a partir de los patrones puros de los gases refrigerantes de que se dispone. Los gases que compondrán las diferentes mezclas serán elegidos de tal forma que al analizarlos se obtengan picos perfectamente definidos y que permitan elaborar sus correspondientes rectas de calibrado. Se utiliza la calibración lineal, que es la que más se ajusta a nuestro método y se analiza cada mezcla patrón preparada como mínimo 3 veces.

La existencia de aceites, humedad y partículas en los residuos a analizar puede dañar el equipo, lo que implica la necesidad de un proceso previo a la analítica así como la adecuación de las condiciones de temperatura y presión de entrada al cromatógrafo.

Antes del inicio de cada análisis, será necesario limpiar y hacer el vacío del circuito por donde circularán las muestras a analizar para garantizar que no exista contaminación con residuos anteriores.

Como ejemplo de esta novedosa aplicación, podemos ver que el R 404a es un gas refrigerante, cuya mezcla comercial tiene una composición de 44% de R125, 52% de R143a y 4% de R134a. Si se elaboran 3 mezclas diferentes, constituidas por los 3 compuestos que forman el R 404a (R134a, R143a, R125) y se pinchan 8 veces cada una para comprobar la reproducibilidad de los resultados y obtener las rectas de calibrado de cada compuesto, vemos que cada para HFC se definirá su tiempo de retención y su área de pico, el factor de respuesta y su concentración en la mezcla pinchada.

La botella que contiene el residuo de gas refrigerante a analizar se conectará al mismo circuito usado en la calibración del equipo. En el cromatograma (figura 1) se observan 3 picos, uno por cada uno de los 3 compuestos que forman dicho gas.

Usando las rectas de calibración descritas anteriormente, y por interpolación en las mismas de los resultados obtenidos (área), se obtienen los porcentajes (% en peso en la muestra) de cada compuesto en la mezcla analizada. Con los factores de respuesta y las áreas obtenidas calculamos las concentraciones de los compuestos en % peso y los datos de desviación estándar y límite de confianza.

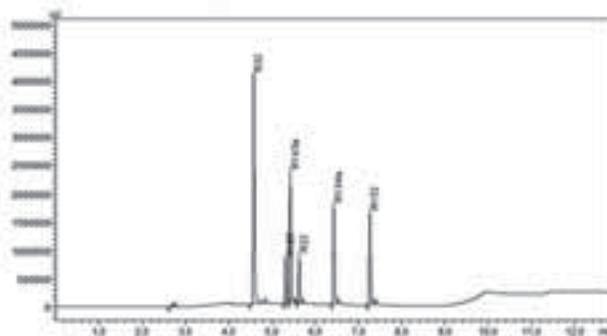


Figura 1. Cromatograma muestra de R-404a hecha con Shimadzu GC-2010 Plus Tracera

Para finalizar, debemos comprobar si dicho gas cumple con los estándares de calidad impuestos en la norma AHRI 700 (tabla 1). Shimadzu GC-2010 Plus Tracera.

Compuesto	Composición permitida por AHRI (%)	Composición medida (%)	Error promedio método	Composición obtenida corregida (%)
R125	42-46	43,59	0,13%	43,72-43,46
R143a	51-53	51,95	0,11%	52,06-51,84
R134a	2-6	4,16	0,67%	4,83-3,49

Para calcular los errores del método comparamos las concentraciones de las mezclas preparadas empíricamente con las obtenidas por el cromatógrafo (tabla 2).

Compuesto	RRFm	Desviación Estándar	t Student	Lim. confianza	Error promedio (%)
R125	1,3263	0,040	2,37	0,036	0,129%
R143a	0,7909	0,018	2,37	0,016	0,112%
R134a	0,8234	0,039	2,37	0,035	0,667%

El procedimiento de análisis de composición para este tipo de residuos cumple las especificaciones impuestas por la normativa vigente en referencia a los estándares de calidad de los gases refrigerantes gracias a la detección por plasma de Helio, óptimo para conseguir alta sensibilidad en el análisis de trazas y a la precisión y repetibilidad requerida para el análisis certificado de composición de gases refrigerantes.

Además, las propiedades universales de detección por plasma permiten la identificación de otros gases que puedan estar presentes, como aire, u otros de interés, como SF6.

Izasascientific.com

Contacto: 902 120 489 IzasaCEcrom@izasascientific.com



SUGELABOR ANUNCIA LA NUEVA TÉCNICA GC-IMS DE LA EMPRESA ALEMANA G.A.S.

Funcionamiento

La espectrometría de movilidad iónica (IMS) es una técnica analítica empleada para separar y detectar compuestos gaseosos en una mezcla de analitos. La separación está basada en el drift time específico de cada compuesto, según el cual los compuestos ionizados recorren una distancia fija (*drift tube*) sometidos a un campo eléctrico definido. Comparada con otras técnicas como TOF MS, los iones viajan a presión atmosférica en sentido opuesto a un flujo de gas inerte (*drift gas*). El drift time de cada compuesto está determinado por la masa del ion y la estructura geométrica, por lo cual las colisiones con las moléculas de *drift gas* son más frecuentes en estructuras estéricas. Por lo tanto, el IMS puede incluso diferenciar moléculas isobáricas. En la detección, la corriente iónica resultante es medida por un electrómetro en función del tiempo.

La ionización a presión atmosférica de las moléculas puede llevarse a cabo de varias formas. G.A.S. usa la ionización química suave conseguida mediante una fuente de tritio (H_3) de baja radiación (por debajo de los límites establecidos por EURATOM), en base a la que se generan *iones reactantes* con el gas a presión atmosférica mediante una cascada de reacciones seguida por una rápida colisión con los electrones emitidos de la radiación- β H_3 [1]. El llamado *Reaction Ion Peak* (RIP) representa el número total de iones disponibles formados. En nitrógeno y aire, respectivamente, los *iones reactantes* pueden ser descritos como $H^+(H_2O)_n$ y $O_2^+(H_2O)_n$. De la ionización química de analitos por iones reactantes resulta la formación de iones específicos de cada analito, cuando la afinidad de los analitos hacia los iones reactantes es mayor que la del agua. La afinidad protónica del agua es 691 kJ/mol, así que todas las moléculas con una afinidad protónica mayor serán ionizadas por transferencia protónica, la cuál es típica en los compuestos orgánicos con heteroátomos. La ionización tiene lugar a presión atmosférica, así que la concentración de analito no se diluye como ocurre en otras técnicas analíticas donde se trabaja

a vacío. Por lo tanto, la IMS es bastante sensible. Los límites de detección están por debajo de ppb para compuestos orgánicos volátiles (VOC).

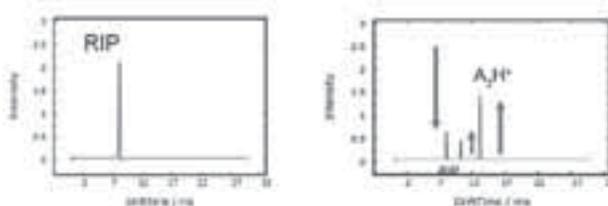
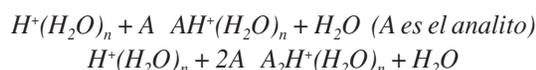


Figura 1 a)

Figura 1 b)

La figura 1 a) muestra un ejemplo de un espectro de IMS sin analito en la que sólo aparece el ion reactante (RIP). La forma alargada y afinada de la señal del RIP demuestra la limpieza del sistema y su posición específica se usa como estándar interno. La figura 1 b) es un espectro que contiene analitos. En ella se muestra una disminución del RIP, mientras que nuevos picos (analitos) se forman como resultado de su detección:



El *drift time* es característico para cada ion, por lo tanto, la identificación del analito es posible. La altura de pico y el área se correlacionan con la concentración, así que la cuantificación es también posible.

En mezclas complejas de analitos, como por ejemplo en alimentos, a menudo es necesaria una segunda e independiente etapa de separación para llevar a cabo un análisis separado de los múltiples compuestos a bajas concentraciones. G.A.S. equipa sus sistemas con columnas cromatográficas de gases. Los compuestos volátiles de interés de las muestras son preseparados en una columna GC. Los compuestos diferenciados pasan consecutivamente a la cámara de ionización, de manera que el analito y/o las interacciones de iones se evitan (figura 2 a). Además, se excluye una competición de los analitos de los iones reactantes, mejorando la sensibilidad de los compuestos individuales.

La configuración de GC-IMS permite una doble separación de mezclas de analitos y la detección por un electrómetro de IMS. Las mediciones de IMS son extremadamente rápidas (21 ms/espectro) y las señales del analito registradas son de alta resolución. En la figura 2 b) se esquematizan los datos de medida en 3D en un GC-IMS y el correspondiente mapa topográfico.

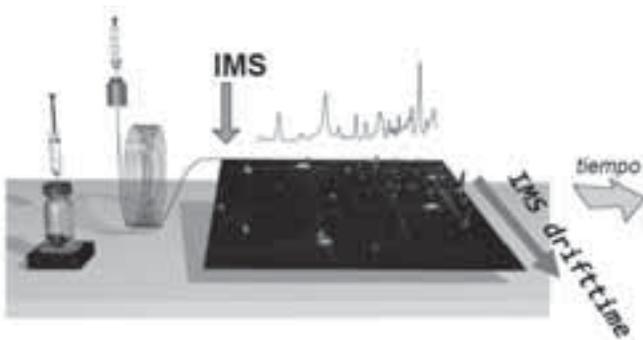


Figura 2 a)

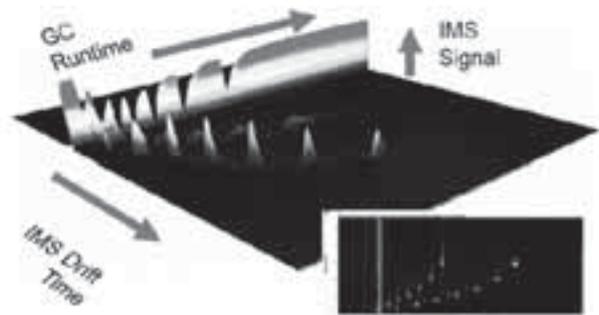


Figura 2 b)

Equipamiento

FlavourSpec® Análisis del espacio de cabeza rápido y sensible.



El análisis rápido en las industrias de alimentos, de bebidas, de envasado y farmacéuticas juega un papel determinante respecto a la autenticación del producto y su control de calidad.

El FlavourSpec® creado por G.A.S. proporciona alta sensibilidad (con un bajo rango de ppb) y la detección fiable de compuestos orgánicos volátiles (VOCs) tanto en muestras líquidas como en sólidas, al ser recogidas directamente del espacio de cabeza. Por lo tanto, los materiales e ingredientes de los productos pueden ser fácilmente detectados o clasificados por su olor o sabor típico.

Las muestras son evaluadas cualitativa y cuantitativamente midiendo las sustancias individuales o, alternativamente, en función de la huella digital reflejada en el cromatograma. Debido a su alta sensibilidad (ya que está equipado con un espectrómetro de movilidad iónica), no se requiere mucho tiempo de preparación de las muestras

y los resultados se logran normalmente en 3 - 15 minutos. Para un manejo sencillo en las rutinas diarias, el sistema está equipado con un inyector de espacio de cabeza CTC automático.

Ejemplos de aplicaciones:

- Control de calidad de las materias primas.
- Prueba imparcial de sabor de producto.
- Soporte de paneles sensoriales.
- Detección temprana de *off-flavors* (diacetilo, TMA).
- Mezclas (té verde, café, cigarrillos, vino).
- Optimización de los procesos de fabricación.
- Volátiles de plásticos / documentos (materiales de embalaje).
- Disolventes residuales en polímeros, cuero, etc.

Para más información diríjase a:



SUGELABOR, S.A.

Tel: +34 915 01 39 36
 Fax: +34 915 01 39 38
 www.sugelabor.com
 info@sugelabor.com

G.A.S.

Gesellschaft für analytische
 SessorsystemeDortmundBioMedicineCenter

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

Dr. Juan Vicente Sancho Llopis
Instituto Universitario de Plaguicidas y Aguas
Departamento de Química Física y Analítica
Universitat Jaume I
Edificio de Investigación I
Campus del Riu Sec
Avda Vicente Sos Baynat, s/n
12071 Castelló de La Plana (Spain)
Tel. +34 964 387363
Fax: +34 964 387368
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: ES 13 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? 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 Correo electrónico

DATOS BANCARIOS

Banco/Caja de Ahorros

Sucursal

Dirección Ciudad.....

D.

Con domicilio en

Y con IBAN ES__ / ____ / ____ / ____ / ____ / ____

en esta Sucursal, ruego 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 20

Firma:

SECYTA



El Comité Editorial

aprovecha para deseáros un Feliz Año 2016
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.

SUS MÉTODOS EXISTENTES.
SUS FUTUROS OBJETIVOS.
**PARTIENDO DE AQUÍ, LLEGUE
DONDE USTED QUIERA.**



Acquity® Arc™

Presentamos una nueva y potente vía para construir el puente entre la HPLC y ACQUITY UPLC®. Imagine una compatibilidad de métodos “plug-and-play” real y un aumento de productividad que permitan a su laboratorio poder dar respuesta a las necesidades científicas, tecnológicas y económicas actuales y futuras. ¿Dónde le llevaría esta versatilidad LC sin compromisos? Elija su camino en waters.com/arc

Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

INDUSTRIA FARMACÉUTICA ▪ CIENCIAS DE LA VIDA ▪ ALIMENTACIÓN ▪ MEDIO AMBIENTE ▪ ANÁLISIS QUÍMICO

©2015 Waters Corporation. Waters, The Science of What's Possible y ACQUITY UPLC son marcas registradas de Waters Corporation. Arc es una marca comercial de Waters Corporation.