



“New developments to refine target, suspect and non-target screening strategies for comprehensive monitoring of the aquatic environment”

Autor: Alberto Celma Tirado

Directores: Prof. Juan Vicente Sancho Llopis y Dr. Lubertus Bijlsma

Environmental and Public Health Analytical Chemistry, Research Institute for Pesticides and Water, University Jaume I.

27 de octubre de 2021

Resumen

En esta tesis se han aplicado diferentes herramientas para perfeccionar los cribados dirigidos, de sospechosos y no dirigidos para la monitorización del medioambiente acuático, con especial énfasis en el acoplamiento de la separación por movilidad iónica (IMS) con espectrometría de masas de alta resolución (HRMS).

En primer lugar, se ha explorado la aplicabilidad de la cromatografía líquida de ultra alta resolución (UHPLC) acoplada a IMS-HRMS para el análisis de muestras ambientales. Para ello, se ha desarrollado una base de datos para 556 microcontaminantes orgánicos (OMPs), con información acerca de tiempo de retención (RT), sección transversal de colisión (CCS), así como masa exacta para iones precursor y producto de un total de 970 aductos. Además, se ha estudiado el valor adicional de la medición de CCS para la identificación de OMPs, incorporándolo en criterios de identificación ampliamente aceptados. Además, también se describe el papel, potencial y principales beneficios obtenidos con la utilización de este tipo de instrumentos. Por otro lado, se ha explorado el desarrollo y aplicación de herramientas de interpolación de RT, así como herramientas de predicción *in silico* de RT y CCS, para su incorporación en cribados de sospechosos.

Por otro parte, se ha explorado además el análisis basado en efectos (EDA -effect based analysis-) como una herramienta completa para la monitorización de la calidad del agua. En este sentido, se presenta un estudio en el que se evalúa la toxicidad de diferentes muestras de agua frente a un panel de 8 bioensayos. Además, esta toxicidad se pone en contexto mediante un completo análisis químico mediante UHPLC-IMS-HRMS y UHPLC acoplado a espectrometría de masas de baja resolución de más de 1.500 OMPs.

Finalmente, las estrategias previamente desarrolladas se aplican al campo de la monitorización del consumo de Nuevas Sustancias Psicoactivas (NPS) en muestras de aguas residuales y orina de potenciales consumidores.