

CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

SECYTA

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE
CROMATOGRAFÍA
Y TÉCNICAS AFINES

BOLETIN DE LA SECYTA
VOLUMEN 33 N.º 2 (2012)
33
WWW.SECYTA.ORG

HPIC

Mayor resolución, análisis más rápidos

CROMATOGRAFIA
ICS
4000
CAPILAR



El nuevo equipo de
DIONEX **Thermo**



VERTEX
Technics

www.vertex.es



ISO 9001:2008

Barcelona
C/ Comercio, 12
08902 L'Hospitalet de Llob.
Tel. 932 233 333
Fax 932 232 220

Madrid
C/ Sofia, 177 J, local C
28022 Madrid
Tel. 913 240 014
Fax 913 134 753

Bilbao
944 471 999

Vigo
986 200 366

CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

Madrid, Diciembre de 2012 Vol. 33, núm. 2

ISSN 1132-1369

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

ÍNDICE

50	EDITORIAL
51	ARTÍCULO Compuestos de la dieta y su efecto en cáncer de colon: Evaluación Foodómica mediante técnicas de Transcriptómica y Metabolómica. <i>A. Valdés, V. García-Cañas, C. Simó, A. Cifuentes, C. Ibáñez.</i>
	NOTICIAS DE LA SECyTA
69	XII Reunión científica de la SECyTA (41ª Reunión científica del GCTA)
72	VIII Edición de los Premios “José Antonio García Domínguez”
76	12ª Asamblea General de la SECyTA
83	Nuevos socios
	INFORMACIONES
85	Congresos celebrados
86	Calendario de actividades
	INFORMACIÓN BIBLIOGRÁFICA
88	Artículos de interés
	DE NUESTRAS EMPRESAS COLABORADORAS
91	Novedades técnicas

Redacción: María Luz Sanz (mlsanz@iqog.csic.es)
Ana Cristina Soria Monzón (acsoria@iqog.csic.es)
Instituto de Química Orgánica General (CSIC).
Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid. Tel. 91 562 29 00
Fco. Javier Moreno (javier.moreno@csic.es)
José Ángel Gómez Ruiz (joseangel.gomez.ruiz@csic.es)
Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación (CSIC-UAM).
Nicolás Cabrera 9, 28049 Madrid. Tel. 91 001 79 00

Publicidad: Mario Fernández (mario@iqog.csic.es)
Instituto de Química Orgánica General (CSIC).
Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid. Tel. 91 562 29 00

Depósito legal: M-1902-1975

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

Diseño de portada: Pau de Riba

Los autores son responsables del contenido de sus artículos.

EDITORIAL

Quiero celebrar con vosotros el éxito alcanzado en la XII Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (41ª Reunión del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines) que se celebró del 14 al 16 de noviembre de 2012 en el moderno y céntrico Palau de Fires i Congressos de Tarragona. Se presentaron unas 180 comunicaciones científicas, 38 de ellas en forma oral agrupadas en dos sesiones paralelas. Prestigiosos investigadores nacionales e internacionales impartieron también 3 conferencias plenarias y 4 conferencias invitadas. Como ya es habitual en las Reuniones Científicas de la SECyTA, aquéllos que lo deseen pueden enviar sus trabajos para ser publicados en el Journal of Chromatography A, una vez hayan sido evaluados por el sistema de revisión tradicional.

Ha sido una reunión muy numerosa, con más de 200 asistentes y una participación muy elevada (superior al 35%) de jóvenes investigadores, por lo que es una satisfacción comprobar la implicación de las nuevas generaciones de científicos en las novedades de las técnicas de separación y su participación en nuestra Sociedad. Por otro lado, la colaboración de las casas comerciales, impartiendo seminarios y presentaciones técnicas dentro del programa científico, ha permitido a los asistentes conocer los últimos avances en la instrumentación científica que repercutirán favorablemente en nuestras investigaciones relacionadas con el desarrollo de nuevos métodos de separación.

El éxito de la reunión se debe a varios factores, entre los que podríamos destacar el apoyo económico de las casas comerciales, las 55 becas concedidas a los jóvenes investigadores por la Sociedad, y la continuidad de los premios José Antonio García Domínguez, pero quiero resaltar que gran parte del éxito se debe al enorme trabajo realizado y a la gran dedicación de la Dra Rosa María Marcé, organizadora de la reunión, a la que quiero felicitar y agradecer el haber conseguido una organización perfecta. Quiero hacer extensivas mis felicitaciones a la secretaría técnica de la reunión, el “Grupo Pacífico”, que ha realizado también una gran labor.

El acta de la asamblea anual de la SECyTA, que tuvo lugar en el marco de la reunión, se va a colgar en breve en la página web de la Sociedad para que todos aquellos socios que no hayan tenido oportunidad de asistir a ella, tengan acceso a la información allí tratada. Asimismo, encontraréis información más detallada sobre la reunión y un resumen de la asamblea en esta edición del boletín.

Nuestras reuniones anuales son una de las actividades prioritarias de la Sociedad, donde tienen lugar el encuentro de los socios, la divulgación de los últimos resultados de nuestras investigaciones, la discusión de los resultados más novedosos presentados, la puesta al día sobre las novedades en instrumentación analítica, la incorporación de socios jóvenes, etc. Es por ello que nos esforzamos en su organización, haciéndolas lo más atractivas posibles. En ese sentido, la próxima XIII reunión de la SECyTA, se celebrará en el Puerto de la Cruz (Tenerife) del 8 al 11 de Octubre de 2013, en conexión con el 20th International Symposium on Electro- and Liquid Phase-Separation Techniques (ITP2013), que tendrá lugar del 6 al 9 de Octubre, coincidiendo el día 9 con la XIII reunión de la SECyTA. Ambos congresos están organizados conjuntamente por la Universidad de La Laguna y el CSIC. Se está ultimando la página web, que estará disponible en breve, donde se recogerán las actividades de ambas reuniones. Creo que van a ser unas jornadas interesantes y provechosas para todos nosotros, por lo que os animo a todos a asistir a ellas.

María José González Carlos
Presidenta de la SECyTA

ARTÍCULOS

Compuestos de la dieta y su efecto en cáncer de colon: Evaluación Foodómica mediante técnicas de Transcriptómica y Metabolómica.

Alberto Valdés, Virginia García-Cañas, Carolina Simó, Alejandro Cifuentes*, Clara Ibáñez

Laboratory of Foodomics, CIAL, CSIC. Nicolás Cabrera 9, 28049 Madrid

*a.cifuentes@csic.es, Tel: 91-0017955

RESUMEN

Actualmente se diagnostican en España más de 25.000 nuevos casos de cáncer de colon al año, llegando a ser el cáncer más frecuente en nuestro país y la segunda causa de muerte por cáncer en la Unión Europea. No obstante, las posibilidades de curación, cuando el cáncer se diagnostica a tiempo y el tumor es aún pequeño, son muy altas. Por ello, es muy importante el diagnóstico precoz y, sobre todo, la prevención de esta enfermedad, en la cual la alimentación juega un papel decisivo. En este sentido, se ha observado una menor incidencia en poblaciones que consumen preferentemente una dieta de “estilo mediterráneo”, existiendo un número creciente de estudios relativos al efecto positivo de distintos componentes de la dieta frente a esta enfermedad. La presente revisión bibliográfica se centra en trabajos que han evaluado los efectos de dichos compuestos de la dieta sobre el cáncer de colon, empleando principalmente (pero no exclusivamente) modelos celulares humanos, y siguiendo un enfoque Foodómico, concretamente utilizando herramientas Transcriptómicas y Metabolómicas.

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Cáncer de colon y factores dietéticos

El cáncer de colon es una de las causas más importantes de muerte en la sociedad. El desarrollo de la enfermedad pasa por múltiples etapas que a menudo se traducen en periodos de tiempo prolongados. Por ello, la mejora en la dieta diaria y otros aspectos nutricionales destacan en la prevención primaria de esta patología. Así, se estima que hasta el 80% de los casos diagnosticados de cáncer de colon podrían deberse a una dieta incorrecta, como puede ser el consumo excesivo de alcohol y dietas ricas en calorías, lípidos, carnes rojas e hidrocarburos aromáticos policíclicos (Reddy y col., 2003; Ahmed, 2004).

La “Dieta Mediterránea” ha ganado popularidad en los últimos años debido al elevado número de estudios epidemiológicos que han demostrado una menor inciden-

cia de enfermedades crónicas, incluido el cáncer de colon, en poblaciones que consumen preferentemente este tipo de dieta, caracterizada por el consumo de una elevada cantidad de frutas, verduras, fibra, aceite de oliva virgen, etc. Por otro lado, durante las últimas décadas se han estudiado varios grupos de ingredientes alimentarios como potenciales quimiopreventivos y existe un número creciente de estudios relativos al efecto positivo de componentes de la dieta en el desarrollo de cáncer de colon o colorrectal (CRC), como los polifenoles (Rudolf y col., 2007; Sant y col., 2007; Araujo y col., 2011; Bobe y col., 2012), las isoflavonas (Bennink, 2001), los fitoesteroles (Rao y Janezic, 1992), los ácidos grasos (Williams y col., 2010; Cai y col., 2012; Gerber, 2012; Key y col., 2012; Wu y col., 2012), la fibra (Hansen y col., 2012), las proteínas (Williams y col., 2010), los carbohidratos (Aune y col., 2012), los carotenoides (Wang y col., 2012), las vitaminas (Gorham y col., 2005; Key y col., 2012; Tavani y col., 2012) y los minerales (Chen y col., 2012; Key y col., 2012; Wang y col., 2012; Wark y col., 2012), entre otros.

1.2. Alimentos, salud y tecnologías “-ómicas”

Dada la complejidad en la composición de la dieta, es difícil establecer una relación inmediata entre un ingrediente o ingredientes de la misma y su posible actividad anti-cancerígena, anti-inflamatoria, anti-microbiana, etc. Además, existen otros factores como los efectos sinérgicos entre nutrientes, la variabilidad genética entre individuos, y otros factores ambientales que dificultan el poder atribuir un efecto a un nutriente o compuesto bioactivo en concreto. Entre los posibles efectos de los componentes bioactivos de la dieta en las células del organismo a nivel molecular, se han descrito modificaciones de la expresión génica (transcriptoma), modificaciones en la organización de la cromatina (epigenoma), cambios en la expresión de proteínas incluyendo modificaciones post-traduccionales (proteoma), así como cambios en el metabolismo (metaboloma). Esta variedad de efectos dificulta aún más el estudio de la actividad biológica de los compuestos bioactivos de la dieta.

En los últimos años, se ha producido un notable avance en la investigación en el área de las ciencias de la alimentación, propiciado por la aplicación de tecnologías avanzadas procedentes de otras disciplinas como la farmacología, la medicina, la biotecnología y la bioinformática. La aplicación de estas técnicas avanzadas, ha dado lugar a una nueva disciplina que nuestro grupo ha definido como Foodómica (Cifuentes, 2009; Herrero y col., 2010; Herrero y col., 2011; García-Cañas y col., 2012). Esta nueva disciplina aborda la investigación en Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición mediante el estudio de los distintos niveles de expresión molecular (transcritos, proteínas, metabolitos) directamente en el alimento o en muestras biológicas relacionadas con su actividad, empleando para ello herramientas “ómicas”, tales como Transcriptómica, Proteómica y Metabolómica. El objetivo último de la Foodómica es mejorar la salud y bienestar de los consumidores a través de su dieta, elevando la calidad y seguridad de los alimentos y proporcionando una base científica sólida a las alegaciones de salud de nuevos alimentos o ingredientes funcionales. El empleo del enfoque foodómico al estudio del efecto de los componentes de la dieta en el tratamiento y prevención de enfermedades crónicas, debe permitir por tanto obtener información detallada acerca de los cambios que se producen en los diversos niveles de organización molecular (transcriptoma, epigenoma, proteoma y metaboloma) en las células, tejidos y órganos en respuesta a los nutrientes u otros componentes bioactivos de la dieta, mejorando nuestro conocimiento sobre los efectos de la misma.

2. TÉCNICAS TRANSCRIPTÓMICAS

El transcriptoma es el conjunto de RNAs transcritos que hay en una célula o tejido en una etapa específica del desarrollo o condición fisiológica. La Transcriptómica emplea técnicas que permiten la detección en paralelo de un número elevado de secuencias con el objeto de estudiar el transcriptoma (Wang y col., 2009). Esta disciplina se ha aplicado al estudio de los efectos no deseados en organismos modificados genéticamente (Cellini y col., 2004), al estudio de la genética del Alzheimer (Serretti y col., 2007) o a estudios nutrigenómicos (García-Cañas y col., 2010). Además, esta disciplina se ha empleado en el estudio del efecto de distintos compuestos bioactivos de la dieta en diferentes modelos biológicos y puede considerarse como un primer paso en la investigación de la actividad biológica de estos compuestos a nivel molecular (Johnson, 2011; Valdés y col., 2012a). Para el estudio de los transcritos pueden utilizarse técnicas clásicas como Northern blot y retrotranscripción inversa unida a la reacción en cadena de la polimerasa a tiempo real

(RT-qPCR) que permiten determinar la expresión de transcritos individuales. Otras técnicas más novedosas pero caras son el análisis seriado de la expresión génica (SAGE) (Velculescu y col., 1995) o la determinación masiva de secuencias en paralelo (MPSS) (Brenner y col., 2000), que permiten la secuenciación del transcriptoma completo. En los últimos años se ha producido un notable avance en las técnicas de análisis de alto rendimiento, como el microarray de expresión génica y la secuenciación masiva del RNA (RNA-Seq). Estas técnicas permiten analizar un elevado número de RNAs transcritos en muestras biológicas de manera rápida y eficaz (Morozova y Marra, 2008).

2.1. Microarrays de expresión génica

Esta técnica está basada en la hibridación específica de ácidos nucleicos y puede utilizarse para medir las cantidades relativas de miles de genes entre dos o más muestras. Existen dos tipos de microarrays de expresión génica en función de su diseño, los microarrays en sustratos planos (“chips de DNA”) y los microarrays en sustratos esféricos (“de partículas”) (Ramakrishnan y col., 2005; Trachtenberg y col., 2012). Los “chips de DNA” se caracterizan por tener secuencias de DNA inmovilizadas en un sustrato sólido en localizaciones conocidas. En los microarrays de partículas, las secuencias son inmovilizadas en esferas y distribuidas aleatoriamente, pero cada esfera porta un código para su posterior identificación. Ya sea por el conocimiento de las localizaciones en el caso de los “chips de DNA” o por los identificadores que contienen las esferas, es posible reconocer específicamente las secuencias que constituyen el transcriptoma.

En cuanto al tipo de molécula inmovilizada, los chips de DNA se dividen en microarrays de oligonucleótidos y de DNA complementario (cDNA) (Nambiar y col., 2005; Stafford, 2009).

En el caso de los microarrays de oligonucleótidos (Lipshutz y col., 1999), las plataformas de Affymetrix (<http://www.affymetrix.com/estore/>) y Agilent (<http://www.home.agilent.com/>), son las más extendidas y presentan diferencias significativas en función del sistema de fabricación “in situ” que emplea cada una. Por un lado, los microarrays fabricados por Agilent contienen secuencias de 60 nucleótidos sintetizados in situ mediante la tecnología de SurePrint (o “ink-jet”) (Hughes y col., 2001). Esta tecnología se basa en la microinyección secuencial de las distintas bases nucleotídicas, de un modo similar al que lo hacen las impresoras de tinta. Estas secuencias son muy específicas, y con esta tecnología, Agilent ha conseguido introducir más de 250.000

sondas en cada chip. Por otro lado, los microarrays de expresión de Affymetrix contienen secuencias de 25 nucleótidos sintetizados *in situ* mediante fotolitografía (Barczak y col., 2003). Esta tecnología se basa en la síntesis química mediada por luz y el empleo de máscaras, similar a la tecnología utilizada para la fabricación de circuitos integrados. El uso de la fotolitografía ha permitido sintetizar gran cantidad de sondas (> 750.000) sin necesidad de aumentar el tamaño del chip. Para la detección de cada RNA transcrito se utilizan al menos 10 secuencias de 25 nucleótidos, lo que permite solventar el problema de especificidad del uso de secuencias tan cortas. Además, esta estrategia permite detectar variaciones en la secuencia de los RNA transcritos, ya sea por un procesamiento alternativo del RNA o por la presencia de polimorfismos de nucleótidos simples (SNPs) (Stafford, 2009).

En el caso de los microarrays de cDNA, las secuencias empleadas tienen de 500 a 5000 nucleótidos, se sintetizan previamente y se depositan en el sustrato sólido mediante impresión mecánica robotizada (Duggan y col., 1999). El uso de secuencias tan largas puede dar lugar a problemas como la hibridación cruzada y la renaturalización parcial del RNA transcrito (Okoniewski y Miller, 2006). La hibridación cruzada se produce cuando un RNA transcrito es reconocido por distintas secuencias del microarray o una secuencia del microarray reconoce varios RNAs transcritos. La renaturalización parcial del RNA transcrito dificulta la hibridación con las secuencias del microarray, por lo que disminuye la eficiencia de hibridación (Nambiar y col., 2005).

La plataforma de microarrays de partículas (Illumina, <http://www.illumina.com>) consiste en esferas de sílice recubiertas con más de 100.000 secuencias de 50 nucleótidos sintetizadas previamente, capaces de detectar hasta 44.000 secuencias diferentes. Estas esferas son distribuidas aleatoriamente sobre sustratos sólidos, donde se depositan posteriormente las muestras para la hibridación. Esta estrategia permite obtener una mayor densidad de secuencias que la obtenida con la síntesis *in situ* o la impresión mecánica de secuencias sintetizadas previamente (Gunderson y col., 2004).

Generalmente, el tratamiento de la muestra consiste en la extracción del RNA de las células o tejidos y su marcaje con distintos reactivos. Estas muestras son incubadas sobre el microarray en condiciones controladas con el fin de obtener la hibridación específica de las secuencias que constituyen el transcriptoma. A continuación, y tras una etapa de lavado, se lleva a cabo la detección de las señales de hibridación mediante un sistema de escáner de elevada resolución y sensibilidad. La señal recogida será transfor-

mada posteriormente en un valor numérico (Nambiar y col., 2005; Storhoff y col., 2005). Normalmente, las moléculas se marcan con biotina y posteriormente con distintos fluoróforos (Cy3 y Cy5), aunque también se pueden emplear reactivos quimioluminiscentes o radiactivos. El procedimiento de marcaje varía en función del esquema de detección que se vaya a utilizar, dos canales o un canal (ver Figura 1). En el caso de usar el sistema de dos canales (Figura 1A), cada muestra se marca con un fluoróforo y se analiza la competición de hibridación que hay utilizando un microarray. El uso de dos canales puede provocar desviaciones en las eficiencias de detección, por lo que se puede utilizar un segundo microarray con las muestras marcadas inversamente para compensarlo (Dombkowski y col., 2004). En el caso de la detección por un canal (Figura 1B), todas las muestras son marcadas con el mismo compuesto lo que reduce las diferencias en la eficiencia de detección (Churchill, 2002). Es necesario utilizar el mismo número de microarrays que de muestras (al menos dos) para poder determinar la cantidad relativa del RNA transcrito (Storhoff y col., 2005; Stafford, 2009; Trachtenberg y col., 2012).

Antes de llevar a cabo la cuantificación relativa de los niveles de expresión del RNA transcrito en las distintas condiciones experimentales, es necesario normalizar los datos con el objetivo de eliminar las variaciones entre la cantidad del RNA inicial, la eficiencia de marcaje y la detección de la fluorescencia (Niculescu y col., 2007). Este paso varía en función de la plataforma y la estrategia de marcaje utilizada. Así, para poder evaluar las técnicas aplicadas y los datos obtenidos, la organización Microarray Gene Expression Data (MGED) (<http://www.mged.org/>) ha establecido la guía de mínima información sobre experimentos de microarray (MIAME) para la publicación de los datos de microarray. También se han creado varias bases de datos públicas, como ArrayExpress (<http://www.ebi.ac.uk/arraxpress/>) o Gene Expression Omnibus (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/geo/>) donde se pueden cargar y almacenar todos los datos transcriptómicos experimentales que se obtienen con esta tecnología.

Tras la normalización, los datos son analizados estadísticamente con el objetivo de identificar aquellos genes diferencialmente expresados entre las distintas condiciones estudiadas (Burton y McGehee, 2004). Las listas de genes cuya expresión se ha visto alterada pueden filtrarse según la significación estadística y también según la tasa de cambio (o cantidad relativa de una secuencia en una condición experimental determinada con respecto a una muestra control o de referencia).

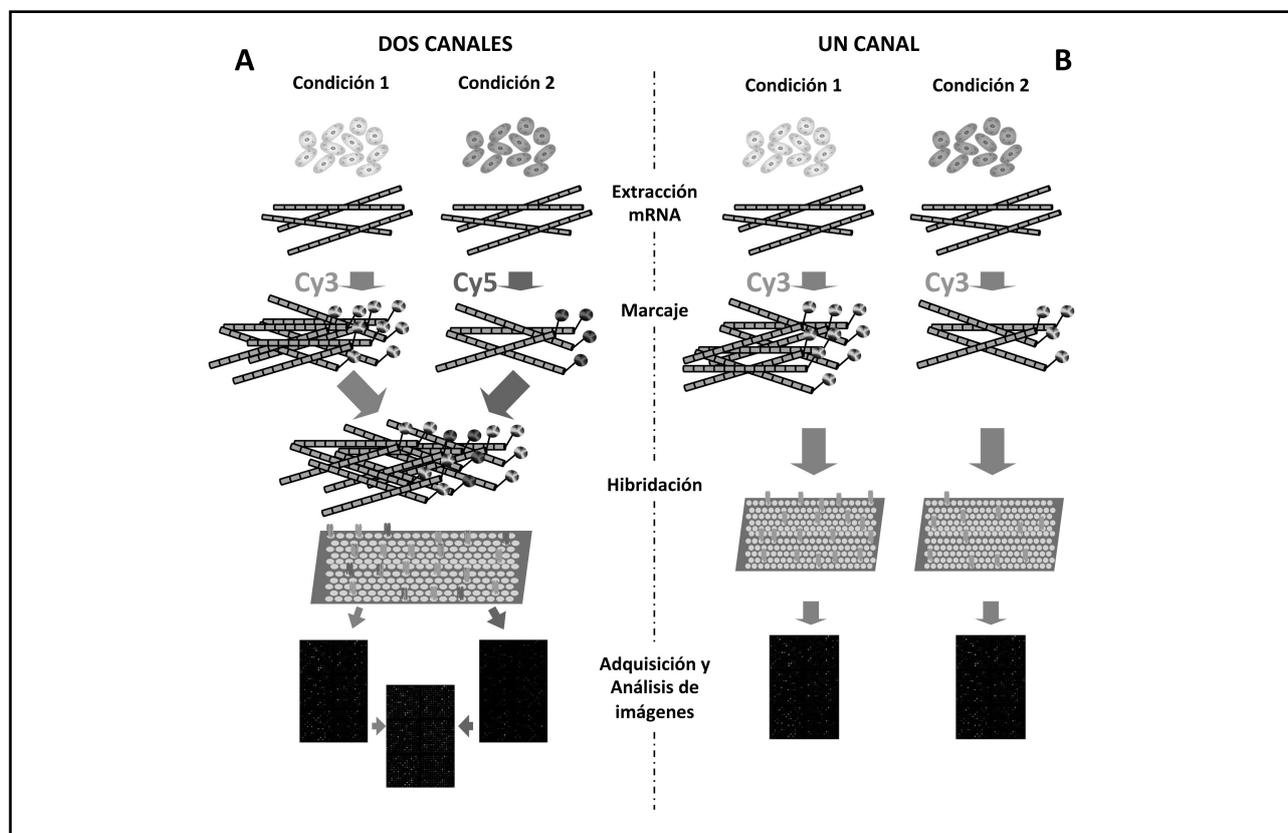


Figura 1. Esquema de detección de fluorescencia en los microarrays de expresión génica. A, utilizando dos canales de detección. B, utilizando un canal de detección.

2.2. RNA-seq

Aunque la técnica del microarray de expresión está muy extendida, presenta algunas limitaciones como la necesidad de conocer previamente el transcriptoma en estudio, la posible hibridación cruzada (explicada previamente) o el intervalo dinámico limitado (Wang y col., 2009). Recientemente, estas debilidades se han intentado solventar con el desarrollo de nuevas técnicas basadas en la secuenciación masiva, denominadas técnicas de RNA-seq. A diferencia de las técnicas de microarray, las técnicas de RNA-seq permiten obtener la secuencia completa del cualquier transcriptoma sin conocerlo a priori y tienen un intervalo dinámico mayor (Wilhelm y Landry, 2009).

Las técnicas de RNA-seq aparecieron comercialmente en el año 2005, y actualmente las plataformas 454 GS FLX de Roche, Genome Analyzer II de Illumina y AB SOLiD de Applied Biosystems son las más extendidas. No obstante, se han desarrollado otras plataformas como HeliScope, SMRT o Ion Torrent. Aunque cada plataforma

presenta características técnicas diferenciadoras (enzimas, hardware, software), todas ellas tienen la característica común de utilizar sistemas miniaturizados que posibilitan el uso de pequeñas cantidades de RNA y de reactivos (lo que permite abaratar costes) (Wang y col., 2009).

El RNA extraído de las células o tejidos requiere una preparación antes de su análisis. En primer lugar, se elimina el RNA ribosómico (rRNA), ya que ocupa el 90% del RNA total y sólo se quiere secuenciar el RNA mensajero (mRNA). Una vez aislado o enriquecido, el mRNA se hace hibridar con distintas sondas en función de la plataforma (oligo dT o hexámeros aleatorios), para su retrotranscripción a DNA complementario (cDNA) (Wilhelm y Landry, 2009). Una vez sintetizado el cDNA, cada plataforma sigue distintos tratamientos antes de su secuenciación. Por un lado, el cDNA puede inmovilizarse directamente sobre un sustrato plano como en las plataformas HeliScope o SMRT. En las plataformas 454 GS FLX, AB SOLiD e Ion Torrent (Figura 2), el cDNA se inmoviliza sobre un sustrato esférico, y es amplificado mediante

PCR en emulsión. En la plataforma Genome Analyzer II, el cDNA requiere la unión de varios adaptadores para su posterior inmovilización a un sustrato plano y su amplificación (Mardis, 2008; Metzker, 2010; Egan y col., 2012).

Para llevar a cabo la secuenciación, es necesario el uso de sistemas de microfluídica para controlar los volúmenes y reactivos necesarios, y escáneres muy sensibles para la detección de las señales generadas durante la secuenciación. Así, cada plataforma ha desarrollado su propio sistema.

La plataforma Genome Analyzer II (Figura 2A) aplica mezclas de los cuatro nucleótidos marcados con distintos fluoróforos y modificados con 3'-O-azidometil, en varios ciclos. Esta modificación bloquea la incorporación de más de un nucleótido por la DNA polimerasa en cada ciclo. Tras cada ciclo, los fluoróforos y los terminadores se eliminan mediante un lavado, y así pueden incorporarse el resto de los nucleótidos hasta completar la secuencia. La señal de fluorescencia es recogida por el escáner ciclo a ciclo y, finalmente, se procesa. Mediante esta técnica se obtienen secuencias de 25-35 nucleótidos.

La plataforma Ion Torrent (Figura 2B) es la única que no utiliza la fluorescencia como método de detección. La secuenciación se lleva a cabo midiendo el cambio de pH tras la liberación de H⁺ durante la incorporación de nucleótidos con un array de microsensors semiconductores. Los nucleótidos se añaden en distintos ciclos, pudiéndose secuenciar fragmentos de hasta 250 nucleótidos.

La plataforma 454 GS FLX (Figura 2C) utiliza la pirosecuenciación, que consiste en depositar cada microesfera con el cDNA amplificado en una placa PicoTiterPlate. En este sistema, la secuenciación se efectúa mediante una serie de reacciones enzimáticas con las enzimas DNA polimerasa, ATP sulfurilasa, luciferasa y apirasa, y los sustratos luciferina y adenosin 5'-fosfosulfato (ASP). La microfluídica permite hacer ciclos en los que se van adicionando a la placa de forma secuencial los reactivos necesarios junto con los distintos nucleótidos. Cuando la DNA polimerasa incorpora un nuevo nucleótido, el pirofosfato liberado es convertido a adenosin trifosfato (ATP) en presencia de ASP. En presencia de ATP, la luciferasa es capaz de transformar la luciferina en oxiluciferina, y la fluorescencia generada es recogida por el escáner y procesada para reconstruir la secuencia del fragmento. Mediante este método se han conseguido secuenciar fragmentos de hasta 800 nucleótidos.

La plataforma SOLiD (Figura 2D) se basa en la secuenciación mediante ligación. Para ello se utilizan

pequeñas sondas marcadas con fluoróforos, que se van ligando sobre el fragmento que se quiere secuenciar (el fragmento se une a microesferas con un adaptador de ligación universal). Cada sonda contiene un fluoróforo en el extremo 3' que viene definido por los dos primeros nucleótidos del extremo 5'. En cada reacción de ligación se adquiere la señal de fluorescencia, a continuación se elimina el fluoróforo y se vuelve a ligar una nueva sonda. Una vez que se han ligado todas las sondas sobre la secuencia, se eliminan mediante un lavado y se repite todo el proceso utilizando otro adaptador universal desplazado una posición hacia el extremo 5'. Cada ciclo se repite varias veces, y las señales son alineadas mediante herramientas bioinformáticas avanzadas para reconstruir la secuencia (25-35 nucleótidos).

En función de la plataforma utilizada, los fragmentos secuenciados pueden variar desde 25 hasta 800 nucleótidos. Una vez conocidas las secuencias de estos fragmentos, éstas son alineadas sobre el transcriptoma a estudiar (si ya ha sido secuenciado), o ensambladas de novo para generar un mapa donde esté representada la estructura transcripcional y/o los niveles de expresión de cada transcrito (Metzker, 2010; Egan y col., 2012).

La principal limitación de esta tecnología es el alto coste de los equipos y reactivos, el sesgo introducido durante la amplificación y la dificultad de secuenciar algunas regiones del genoma (Maitra y col., 2012; Thomson y Oliver, 2012). Además, los datos generados son de difícil almacenamiento y requieren personal altamente especializado, así como herramientas bioinformáticas avanzadas para la alineación de las secuencias y la identificación del RNA transcrito alterado (Wang y col., 2009, García-Cañas y col., 2010, Metzker, 2010).

2.3. Aplicación de la Transcriptómica en el estudio del efecto de los compuestos de la dieta en células humanas de cáncer de colon

El microarray de expresión génica es la técnica de alto rendimiento más empleada para llevar a cabo los análisis transcriptómicos del cáncer colorectal (Bertucci y col., 2004; Cardoso y col., 2007; Nambiar y col., 2010), aunque en los últimos años han ido apareciendo también estudios que utilizan las técnicas de RNA-seq (Mardis y Wilson, 2009; Hawkins y col., 2010). El microarray de expresión génica también se ha extendido a estudios de cultivos celulares de cáncer de colon tratados con compuestos bioactivos de la dieta (ver Tabla 1), pero no hay ningún trabajo que haya aplicado las técnicas de RNA-seq con este objetivo.

Tabla 1. Estudios transcriptómicos basados en la tecnología de microarrays llevados a cabo sobre cultivos celulares de cáncer de colon tras un tratamiento con compuestos bioactivos de la dieta.

Compuesto bioactivo	Línea celular	Plataforma	Número de transcritos	Sistema de detección	Programa de tratamiento de datos	Confirmación por RT-qPCR	Programa de interpretación biológica	Referencia
Curcumina	SW-620	Microarray personalizado	8100	Fluorescencia	Microsoft Excel 97, GeneCluster, Treeview	No		Mariadason y col., 2000
Ácido docosahexaenoico	Caco-2	Atlas-Glass	3800	Fluorescencia	GeneSpring	Sí		Narayanan y col., 2003
3-Galato de epigallocatequina	HT-29	Affymetrix (HG-U95Av2)	≈ 12000	Fluorescencia	Roche Affymetrix Chip	No		McLoughlin y col., 2004
Epicatequina	Caco-2	cDNA Clontech	406	Radiactividad	AtlasImage/GeneSpring	Sí		Noé y col., 2004
Extracto de cacao	CRL-1807	Affymetrix (HG-U95Av2)	≈ 12000	Fluorescencia	Affymetrix GCOS ^a dChip Software	No		Lunec y col., 2004
Vitamina E	HT-29/Caco-2	Microarray personalizado	4069	Fluorescencia	Data SAS Enterprise	Sí		Van Erk y col., 2004
Curcumina	Caco-2	Microarray personalizado	4100	Fluorescencia	Microsoft Excel 97	Sí		Van Erk y col., 2005
Quercetina	HT-29/LT-97	Superarray	96	Quimioluminiscencia	GraphPad Prism	Sí		Pool-Zobel y col., 2005
Butirato	HT-29/LT-97	Affymetrix (HG-U133A 2.0)	≈ 14500	Fluorescencia	Affymetrix Microarray Suite	Sí		
Extracto de manzana	HT-29	Superray	96	Quimioluminiscencia	GraphPad Prism	Sí		Veeriah y col., 2006
Ácido linoleico conjugado	HCT-116/HT-29	TransSignal Human TF	56-345	Quimioluminiscencia		No		Lee y col., 2006
Quercetina	CO-115	Affymetrix (HG-U133 plus 2.0)	≈ 38500	Fluorescencia	Affymetrix GCOS ^a	No		Murtaza y col., 2006
Zumo de aronia	Caco-2	Affymetrix (HG-U133A 2.0)	≈ 14500	Fluorescencia	Affymetrix GCOS ^a	Sí	FatGO	Bermúdez-Soto y col., 2007
Vainillina	HCT-116/ HCT116 ⁺ chr3	Affymetrix (HG-U133A 2.0)	≈ 14500	Fluorescencia	GeneSpring	Sí	Genecards	King y col., 2007
Cinamaldehído	LT-97	Superray	96	Quimioluminiscencia	GraphPad Prism	Sí		Veeriah y col., 2008
Extracto de manzana	HT-29	Microarray personalizado	300	Fluorescencia	GraphPad Prism	Sí		
Ácido fólico	HT-29	Microarray personalizado	2200	Fluorescencia	SPSS	No		Pellis y col., 2008
Ácidos acético, propiónico y butírico	Caco-2/TC-7	Applied Biosystems Human Genome Survey Array	≈ 29000	Fluorescencia	Spotfire DecisionSite/ Bioconductor	Sí	PANTHER	Alvaro y col., 2008
Ácido elárgico	Caco-2	Affymetrix (HG-U133 plus 2.0)	≈ 38500	Fluorescencia	Affymetrix GCOS ^a	Sí	Babelomis/IPA	González-Sarriás y col., 2009
Polidextrosa fermentada	Caco-2	Affymetrix (HG-U133 plus 2.0)	≈ 38500	Fluorescencia	Entorno de programación R	Sí	GO-Elite, GenMapp	Putaaia y col., 2011
Café instantáneo	HT-29	Affymetrix (HG-U133 plus 2.0)	≈ 38500	Fluorescencia	GeneSpring	Sí	GeneSpring	Oleaga y col., 2012
Ácido caféico	HT-29	Affymetrix (HG-U133 plus 2.0)	≈ 38500	Fluorescencia	Entorno de programación R	Sí	GSEA, IPA	Valdés y col., 2012b
Extracto de romero	HT-29/SW-480	Affymetrix (HG 1.0 ST)	≈ 29000	Fluorescencia	Entorno de programación R	Sí	GSEA, IPA	Ibañez y col., 2012a
Extracto de romero	HT-29	Affymetrix (HG 1.0 ST)	≈ 29000	Fluorescencia	Entorno de programación R	Sí	GSEA, IPA	Ibañez y col., 2012a

^a GCOS: GeneChip Operating Software

La Tabla 1 muestra la gran variedad de compuestos bioactivos investigados, siendo la mayoría de ellos de naturaleza polifenólica. Esto es debido al alto número de estudios que demuestran que estos compuestos pueden tener efectos anti-cancerígenos y anti-inflamatorios en distintos tipos de cáncer (Visanji y col., 2006; Johnson, 2011; Valdés y col., 2012a). En unos casos se utilizó el alimento que contiene los polifenoles diluyéndolo (café instantáneo) (Oleaga y col., 2012), digiriéndolo previamente (zumo de aronia) (Bermúdez-Soto y col., 2007) o haciendo un extracto de él (cacao, manzana o romero) (Noé y col., 2004; Veeriah y col., 2006; Veeriah y col., 2008; Valdés y col., 2012b; Ibáñez y col., 2012a). En otros casos se utilizó el polifenol sintetizado artificialmente: 3-galato de epigallocatequina (McLoughlin y col., 2004), ácido caféico (Oleaga y col., 2012), ácido elágico (González-Sarrías y col., 2009), cinamaldehído (King y col., 2007), curcumina (Mariadason y col., 2000; Van Erk y col., 2004), epicatequina (Noé y col., 2004), quercetina (Van Erk y col., 2005; Murtaza y col., 2006); o vainillina (King y col., 2007). También se han ensayado ácidos grasos, tanto de cadena larga como el ácido docosahexaenoico (Narayanan y col., 2003) y el ácido linoleico conjugado (Lee y col., 2006), como de cadena corta (ácidos acético, propiónico y butírico) (Pool-Zobel y col., 2005; Alvaro y col., 2008; Putaala y col., 2011). También se ha estudiado el efecto de vitaminas liposolubles (vitamina E, Lunec y col., 2004) e hidrosolubles (ácido fólico o vitamina B9, Pellis y col., 2008).

Las líneas celulares HT-29 y Caco-2 han sido las más utilizadas para estos estudios. Como puede verse, los microarrays personalizados se han sustituido en los últimos años por microarrays comerciales que cubren gran parte del genoma humano, siendo los microarrays de oligonucleótidos distribuidos por Affymetrix los más utilizados. Puede apreciarse la evolución que ha habido en este campo, ya que se ha pasado de detectar cientos de genes a detectarse la mayor parte del genoma. Aproximadamente el 75% de los estudios utilizan la fluorescencia como método de detección, mientras que la quimioluminiscencia acapara un 20% y la detección con sondas marcadas radiactivamente solamente el 5%. La mayoría de los estudios con microarrays de expresión (70%) utilizan la técnica de RT-qPCR para la validación de los datos de expresión (Gaj y col., 2008). Esta técnica permite la cuantificación de un número limitado de genes, pero proporciona mayor sensibilidad.

A partir del año 2007 se empezaron a usar herramientas bioinformáticas de enriquecimiento funcional como Babelomics (Al-Shahrour y col., 2005), FatiGO (Al-Shahrour y col., 2007), GeneCards (Rebhan y col., 1997),

GenMAPP (Dahlquist y col., 2002), Gene Set Enrichment Analysis (GSEA, Subramanian y col., 2005), GeneSpring (Chu y col., 2001), Ingenuity® Pathway Analysis (IPA, Ingenuity Systems, USA) o PANTHER (Thomas y col., 2003). Estas herramientas permiten analizar los datos transcriptómicos obtenidos mediante el empleo de bases de datos públicas y el análisis estadístico con el objetivo de identificar aquellas rutas de transducción de señales y rutas metabólicas posiblemente alteradas en las condiciones experimentales estudiadas.

3. TÉCNICAS METABOLÓMICAS

La Metabolómica se encarga del estudio sistemático del conjunto del metaboloma. El metaboloma representa el conjunto de metabolitos de un determinado sistema biológico. Los metabolitos son las moléculas de bajo peso molecular que se producen a partir de los procesos químicos o enzimáticos, como resultado del metabolismo celular. Al igual que el proteoma y el transcriptoma, el metaboloma es dinámico, es decir, varía en función de las condiciones ambientales, de la actividad celular, la alimentación, etc. La Metabolómica presenta la posibilidad de detectar cambios mínimos en las rutas metabólicas y la alteración de la homeostasis incluso antes de que sea posible detectar ningún cambio a nivel fenotípico (Nambiar y col., 2010). Dado el potencial de esta tecnología, el número de investigaciones metabolómicas ha aumentado exponencialmente como se puede observar en la Figura 3.

El análisis de los metabolitos de una determinada muestra biológica (fluidos, células, tejidos, etc) se puede enfocar principalmente de cuatro modos distintos: (1) Análisis “diana”, donde se analiza uno o un grupo muy reducido de compuestos preseleccionados en el diseño del estudio; (2) Análisis de un “perfil metabólico” (“metabolic profiling”), donde se analiza un grupo de compuestos con propiedades físico-químicas similares o que participan en una determinada ruta metabólica; (3) Obtención de la denominada “huella dactilar metabólica” (“metabolic fingerprinting”), que consiste en la obtención global de las señales correspondientes a los metabolitos presentes en la muestra. A través de un análisis conjunto y multivariante de estas señales se establecerán relaciones de diferencia y/o similitud entre los individuos que se están analizando (Fiehn, 2002); y por último (4) el análisis “metabonómico”, que trata de medir la respuesta metabólica dinámica de sistemas biológicos vivos ante estímulos fisiológicos o modificaciones genéticas (Nicholson y col., 1999).

La principal dificultad del análisis de los metabolitos radica en su naturaleza heterogénea (iones inorgánicos pequeños, aminoácidos, flavonoides, ácidos nucleicos, lípidos, etc) y su muy distinta concentración en los sistemas biológicos, que puede abarcar varios órdenes de magnitud. Las etapas de tratamiento de la muestra, elección de la técnica analítica y del método de detección son, por tanto, críticas en el análisis de este tipo de moléculas. Por todo ello, no existe una técnica analítica o plataforma aislada que sea capaz de detectar, cuantificar e identificar todos los metabolitos de una cierta muestra biológica. Actualmente, las técnicas más utilizadas para estudios metabolómicos son la resonancia magnética nuclear (NMR) y la espectrometría de masas (MS). La NMR es una técnica no destructiva que permite el análisis de muestras muy complejas con un mínimo (o ningún) pre-tratamiento previo. Aunque la sensibilidad de esta técnica es menor que en el caso de la MS, se obtiene información estructural detallada de las estructuras moleculares. Por otro lado, los espectrómetros de masas de última generación se caracterizan por presentar una gran sensibilidad, resolución y precisión, pudiendo identificar y cuantificar compuestos en muy bajas concentraciones procedentes de muestras biológicas complejas en un solo experimento. El uso de analizadores de masas de alta y ultra-alta resolución (TOF, FTMS, Orbitrap®, etc) es necesario en Metabolómica para poder realizar una posterior identificación tentativa de los metabolitos a través de bases de datos. Los resultados obtenidos mediante NMR y MS aportan una información complementaria, necesaria a la hora de llevar a cabo un análisis del metaboloma lo más completo posible. Estas técnicas pueden usarse de forma aislada o en combinación con técnicas previas de separación (principalmente, LC-NMR, GC-MS, LC-MS y CE-MS).

El objetivo general de cualquier estudio metabolómico aplicado a muestras procedentes de cultivos celulares, tejidos o fluidos biológicos, es el de obtener una visión detallada de los mecanismos moleculares asociados a rutas metabólicas (Llorach y col., 2012). Aunque existe un claro dominio de los estudios a nivel genómico, los cambios metabólicos generados por la interacción gen-nutriente y cómo estos cambios pueden promover la salud de los seres humanos son de gran importancia. La Metabolómica se considera una herramienta novedosa que ha demostrado una gran utilidad en la evaluación de intervenciones dietéticas (Jones y col., 2012; Llorach y col., 2012). Asimismo, se presenta como una herramienta con gran potencial en el conocimiento, la prevención, tratamiento y monitorización terapéutica de múltiples trastornos fisiopatológicos como es el cáncer, ya que la transformación que sufren las células sanas al transfor-

marse en cancerígenas conlleva cambios significativos en los niveles de ciertos metabolitos. Hasta la fecha, la investigación del cáncer se ha centrado fundamentalmente en la caracterización de las alteraciones genéticas y proteicas, existiendo una notable carencia de estudios a nivel metabolómico. Este hecho se debe a la falta de desarrollo de herramientas eficientes que puedan evaluar los resultados de manera eficaz, rápida y satisfactoria, al ser la metabolómica la técnica ómica de aparición más tardía. Sin embargo, algunos investigadores han puesto de manifiesto en diversas revisiones bibliográficas, el potencial de la Metabolómica como herramienta en el avance de la investigación del cáncer (Hartmann y col., 2006; Kim y col., 2008; Feng y col., 2009; Markuszewski y col., 2010; Nambiar y col., 2010; Wang y col., 2010; Davis y col., 2011; Nagrath y col., 2011; Ng y col., 2011; Bu y col., 2012; O'Connell, 2012). La presente revisión se centrará en las aplicaciones metabolómicas dirigidas a la investigación del cáncer de colon empleando principalmente (pero no exclusivamente) modelos celulares humanos.

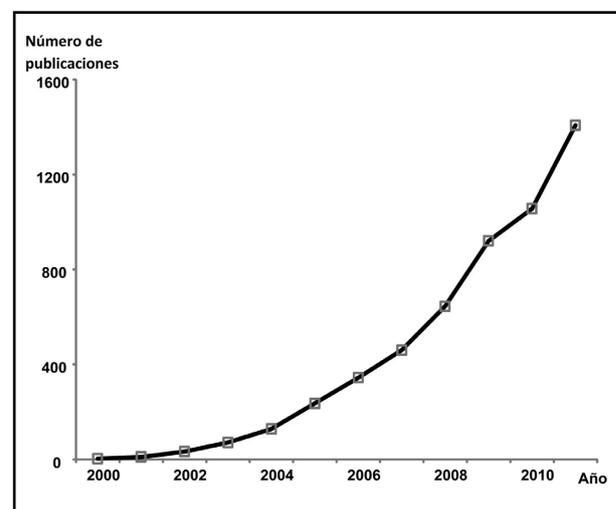


Figura 3. Representación gráfica del número de artículos relacionados con la Metabolómica publicados anualmente en el periodo 2000-2011. Búsqueda realizada a través de la base de datos ISI Web of Knowledge con la palabra clave "Metabolomics".

3.1. La Metabolómica: Una herramienta emergente en estudios de cáncer de colon

En la Tabla 2 se presentan los estudios metabolómicos relacionados con la investigación en cáncer de colon realizados hasta la fecha (Diciembre 2012, según la base de datos ISI Web of Knowledge). En esta tabla se puede observar un uso predominante de la espectrometría de masas acoplada a técnicas de separación, principalmente GC, CE y UPLC, y un uso algo menor de la NMR. Además, se puede observar un número muy elevado de investigadores que se inclinan por el uso de más de una técnica analítica, beneficiándose de la complementariedad entre las mismas, lo cual permite aumentar el número de metabolitos analizados.

Como se puede observar en la Tabla 2, GC-TOF MS es la plataforma metabolómica más utilizada para estudios en cáncer de colon. Mediante dicha técnica, Ma y col. (2009a) pudieron identificar 34 metabolitos diferentes en suero, observando en los pacientes con CRC un acusado descenso en los niveles de L-valina, L-treonina, 1-desoxiglucosa, glicina y ribitol, mientras que el ácido 3-hidroxibutírico aumentaba. Mediante el empleo de la misma plataforma analítica se diseñó un modelo predictivo con el uso de las concentraciones de cuatro metabolitos (ácido 2-hidroxibutírico, ácido aspártico, kinurenina y cistamina) aplicando un software de procesamiento de datos novedoso (AIoutput) creado en el mismo laboratorio (Nishiumi y col., 2012). En otro trabajo reciente (Leichtle y col., 2012), se aplicó el estudio de perfiles de aminoácidos en suero para la búsqueda de las diferencias entre pacientes con cáncer de colon (CRC) y muestras de individuos sanos. 26 metabolitos, principalmente aminoácidos, se encontraron alterados significativamente, destacando el papel discriminante de la glicina y la tirosina, que mejoraban la capacidad de diagnóstico del marcador convencional (antígeno carcinoembrionario, CEA).

Como ya se ha mencionado en la sección 1.1, los ácidos grasos han sido objeto de numerosos estudios de intervención dietética como posibles protectores frente al CRC y se han relacionado directamente con la progresión de la enfermedad, por lo que su determinación y cuantificación es de gran relevancia. Así, Monleón y col. (2009) examinaron muestras fecales procedentes de 21 pacientes con CRC y 11 individuos sanos mediante NMR, detectando una disminución en la cantidad de ácidos grasos de cadena corta como el acetato y el butirato en pacientes con CRC. En una investigación similar (Ludwig y col., 2009) se contrastaron muestras serológicas de 38 pacientes con CRC, 8 pacientes con adenoma y 19 individuos sanos mediante NMR. Las muestras se pudieron discriminar

entre sí, únicamente teniendo en cuenta tres metabolitos (acetato, acetoacetato y 3-hidroxibutirato). Por otro lado, en un estudio llevado a cabo por Ritchie y col. (2010) se reclutó a 222 pacientes con CRC y 220 individuos sanos para llevar a cabo un análisis de huella metabólica mediante dos plataformas metabólicas complementarias (FTICR-MS y HPLC-Q/TOF MS). El efecto más notable observado fue una reducción de los niveles de ácidos grasos hidroxilados y poliinsaturados de cadena larga en pacientes con CRC. Más recientemente, se determinaron las diferencias en el perfil global de los ácidos grasos en el suero de 42 pacientes con CRC y 8 individuos sanos mediante GC-TOF MS (Kondo y col., 2011). Aplicando análisis estadístico multivariante, observaron diferencias significativas en la concentración de nueve ácidos grasos y una tendencia al incremento de los ácidos grasos de cadena larga en los pacientes con CRC.

Un aspecto aún poco explorado es la capacidad de la Metabolómica para determinar diferencias a nivel génico y cromosómico. En un ejemplo de esta novedosa aplicación (Tessem y col., 2010), se diferenció satisfactoriamente entre pacientes con CRC según presentaran la existencia o no de inestabilidad en los microsátélites, normalmente debida a un fallo en los mecanismos de reparación fisiológicos celulares. Además en este mismo trabajo, se encontraron diferencias entre tejidos de pacientes con adenoma, con CRC e individuos sanos. Las principales diferencias observadas en pacientes con CRC fueron un incremento en los niveles de lactato, glicina y taurina, y un descenso muy acusado en mioinositol y glicerofosfolina.

La Metabolómica también se ha utilizado en aplicaciones alternativas relacionadas con la predicción y progreso de la enfermedad. En este sentido, Bertini y col. (2012) analizaron el suero de 153 tumores de pacientes con CRC metastático y de 139 controles sanos mediante un análisis dirigido mediante NMR para estimar la predicción de la supervivencia en pacientes con CRC. En otros estudios que se mencionan a continuación, se ha evaluado la alteración en el metaboloma tras la resección del tumor causante de la patología cancerosa. En esta línea, Ma y col. (2009b) analizaron las diferencias en la orina de 24 pacientes con CRC antes y después de la intervención quirúrgica mediante UPLC-Q/TOF MS observando un descenso en dos metabolitos que fue imposible identificar mediante las bases de datos que se disponen en la actualidad. Un año más tarde este mismo grupo de investigación (Ma y col., 2010) tomó muestras, esta vez de suero, a 30 pacientes con CRC antes y después de su intervención quirúrgica, y las analizaron

Tabla 2. Artículos encontrados en la base de datos ISI Web of Knowledge en los que se estudia el cáncer de colon usando estrategias metabolómicas.

Muestra	Tipo de análisis	Técnica analítica	Procesamiento de datos	Referencia
Cultivos celulares SW1116 y SW480 frente a cultivo de célula sana NCM460	Huella metabólica	GC-TOF MS	AMDIS 2.1	Zimmermann y col., 2007
Tejido de pacientes con CRC primario (n=27) y mucosas control (n=18)	Huella metabólica	GC-TOF MS	ChromatOF 2.32 R	Denkert y col., 2008
Extractos acuosos fecales Pacientes con CRC (n=21) y sanos (n=11)	Huella metabólica	NMR	TopSpin 1.5 MATLAB LIBRA	Monleón y col., 2009
Tejido De pacientes con CRC (n=31). Tejido de tumor y control de mucosa	Huella metabólica	HR-MAS NMR GC-TOF MS	MATLAB SIMCA-P Shimadzu GCMSsolution 2.5	Chan y col., 2009
Tejido Pacientes con CRC (n=16) y pacientes con cáncer de estómago (n=12)	Huella metabólica	CE-TOF MS HPLC-TOF MS	MH R (XCMS) Multixperiment Viewer	Hirayama y col., 2009
Suero Pacientes con CRC (n=38), pacientes con adenoma (n=8) y sanos (n=19)	Análisis diana	NMR	NMRLab PLS Toolbox	Ludwig y col., 2009
Suero Pacientes con CRC (n=31) y sanos (n=8)	Huella metabólica	GC-TOF MS	AMDIS MATLAB 7.0	Ma y col., 2009a
Orina Pacientes con CRC (n=24) antes y después de la cirugía	Huella metabólica	UPLC-TOF MS	Micromass MarkerLynx Applications Manager version 4.0 SIMCA-P 10.0 SPSS	Ma y col., 2009b
Cultivo celular HT-29 (Tratamiento con inhibidores de HDAC ^a y no HDAC ^a)	Análisis diana	Espectrofotometría GC-TOF MS	(sin especificar)	Alcarraz-Vizán y col., 2010
Tejido de pacientes con CRC (n=12): muestra de tumor y de mucosa normal	Huella metabólica	NMR	TopSpin 2.1 Sparky R AMIX	Chae y col., 2010
Suero antes y después de cirugía de 30 pacientes con CRC	Huella metabólica	GC-TOF MS	AMDIS MATLAB 7.0	Ma y col., 2010
Orina Pacientes con CRC (n=60) y sanos (n=63) Orina de rata antes y después de cirugía de ratas enfermas tratadas con DMH (n=8) y controles sanos(n=8)	Huella metabólica Análisis metabonómico de DHM ^b	GC-TOF MS	XCMS online MATLAB 7.0 SIMCA-P 12.0	Qiu y col., 2010
Suero procedente de 3 centros. Pacientes con CRC (n=112), 110 controles (n=110). Grupo de validación: pacientes con CRC (n=110) y controles (n=110)	Huella metabólica	FTICR-MS HPLC-Q/TOF MS	XMAS DISCOVA-metrics ABI QSTAR XL JMP 8.0.1 SAS 9.2 R 2.9.0 JROCFIT	Ritchie y col., 2010
Tejido tumor y sano de 31 pacientes con MSI ^c (n=18) y MSS ^d (n=14) y sanos (n=31)	Huella metabólica	¹ H HR MAS NMR	Matlab	Tessem y col., 2010
Suero Pacientes con CRC (n=42) y sanos (n=8)	Perfil de ácidos grasos	GC-TOF MS	(sin especificar)	Kondo y col., 2011
Cultivo celular SW480 y SW620	Perfil del metabolismo energético	NMR	Chenomx NMR Suite 4.6 The Unscrambler9.7	Maddula y Baumbach, 2011
Cultivo celular HT-29 (cuatro purificaciones de metabolitos distintas)	Huella metabólica	CE-TOF MS	DataAnalysis 4.0	Simó y col., 2011
Orina Sanos (n=444) y enfermos de CRC (n=116)	Huella metabólica	NMR	Chenomx NMRSuite v7.0 SIMCAP+ v12.0.1 STATASE 10.1	Wang y col., 2011
Suero Pacientes con CRC metastásico (n=153) y sanos (n=139)	Huella metabólica	NMR	(sin especificar)	Bertini y col., 2012
Orina Pacientes con CRC (n=61) y sanos (n=62) Grupo de validación: 40 pacientes con CRC y 41 sanos	Huella metabólica	GC-TOF MS UPLC-Q/TOF MS	SIMCA-P+ 12.0	Cheng y col., 2012
Cultivo celular HT-29 y SW480 (tratamiento con extracto de aceite de oliva)	Análisis diana de metabolitos fenólicos	nanoLC-TOF MS	DataAnalysis 4.0	Fernández-Arroyo y col., 2012
Cultivo celular HT-29 (tratamiento con extracto polifenólico)	Huella metabólica	CE-TOF MS UPLC-TOF MS	R (XCMS) MH, MPP	Ibañez y col., 2012a
Cultivo celular HT-29 (tratamiento con extracto polifenólico)	Huella metabólica	CE-TOF MS UPLC-TOF MS	DataAnalysis 4.0 R (XCMS) MH, MPP	Ibañez, y col., 2012b
Suero Pacientes con CRC (n=59) y controles (n=58)	Perfil de aminoácidos	FIA ^e -MS	Analyst 1.4.2 R	Leichtle y col., 2012
Tejido Pacientes con CRC (n=31): muestras de tumor y de mucosa normal	Huella metabólica	GCxGC-TOF MS	ChromatOF 4.21 SIMCA-P GraphPad Prism SPSS	Mal y col., 2012
Suero Pacientes con CRC(n= 60; 12 en cada una de las 4 fases de cáncer) y sanos (n=60). (Grupo de validación 59 pacientes con CRC y 63 voluntarios sanos)	Perfil metabólico	GC-TOF MS	MetAlign AOutput JMP9	Nishiumi y col., 2012
Tejido de ratones (n=131) con y sin mutación en gen APC Suero de ratones (n=126) con y sin mutación en gen APC Cultivos celulares SW480 (n=75) expresando parcial/totalmente el gen APC	Huella metabólica	GC-TOF MS	MetAlign AOutput	Yoshie y col., 2012

^a HDAC= Histone deacetylase; ^b DHM= 1,2-dimethylhydrazine; ^c MSI Inestabilidad microsatellite; ^d MSS Estabilidad microsatellite; ^e FIA= flow injection analysis.

mediante GC-TOF MS. Como resultado observaron ocho metabolitos (L-valina, 5-oxo-L-prolina, 1-desoxiglucosa, L-tirosina, D-turanosa, D-maltosa, ácido hexadecanoico y ácido araquidónico), de los 34 totales identificados, que se encontraban alterados tras la cirugía.

En algunos estudios se ha profundizado en la interpretación biológica con el objetivo de explicar y comprender cambios en las rutas metabólicas asociadas al CRC. Chan y col. (2009) identificaron 31 marcadores metabólicos relacionados con la hipoxia, glucolisis, marcadores de inflamación, biosíntesis de nucleótidos y metabolismo de lípidos y esteroides, cuando compararon tejidos de mucosa normal y tejidos de CRC primario, mediante dos plataformas analíticas (NMR y GC-TOF MS). En otro trabajo, Qiu y col. (2010) observaron una modificación en el ciclo de ácidos tricarbóxicos (TCA) y el metabolismo del triptófano tras analizar la orina de 60 pacientes con CRC y 63 individuos sanos, mediante GC-TOF MS. Más recientemente, este mismo grupo de investigación en otro trabajo (Cheng y col., 2012), profundizó en la alteración de ciertas rutas metabólicas como la glucolisis, ciclo de TCA, ciclo de la urea, el metabolismo de la pirimidina, metabolismo del triptófano, y el metabolismo de las poliaminas mediante la combinación de UPLC-Q/TOF MS y GC-TOF MS. En una investigación similar, Denkert y col. (2008) observaron 82 metabolitos alterados muy significativamente ($p < 0.01$) de los 206 totales detectados, que relacionaron con bajos niveles de intermediarios del ciclo TCA y lípidos, y con el aumento de metabolitos involucrados en el ciclo de la urea, metabolismo de purinas y pirimidinas y de algunos aminoácidos. Por su parte, Hirayama y col. (2009) contrastaron entre distintos tipos de cáncer para tratar de dilucidar qué tipo de modificaciones metabólicas responden a dicha diferencia. Tras examinar 16 muestras de tejido de pacientes con CRC y 12 con cáncer de estómago, concluyeron que todas las células de cáncer evolucionaron a una hiperactividad primaria de consumo de glucosa y acumulación de aminoácidos mediante una adaptación metabólica, mientras que conservaron una dependencia tejido-específica en cuanto a la respiración aeróbica (extrapolación a partir de los niveles de intermediarios en el ciclo TCA y los niveles de nucleótidos).

Siempre que sea posible en los estudios metabolómicos, es muy conveniente el análisis de muestras pareadas, es decir, que la muestra control y tumoral procedan del mismo individuo de manera que, idealmente, las diferencias metabólicas encontradas se deban a la alteración debida a la enfermedad. Siguiendo esta idea, se llevó a cabo un estudio sobre tejido sano y tumoral procedente en ambos casos de 31 enfermos de CRC (Mal y col., 2012)

donde se analizaron las huellas metabólicas mediante GC×GC-TOF MS. Tras el uso de múltiples herramientas informáticas, se observaron alteraciones en la glucolisis, el metabolismo de aminoácidos y nucleótidos, el ciclo de TCA, la osmorregulación y la biosíntesis de ácidos biliares, esteroides y eicosanoides. Otro caso de comparación de muestras pareadas fue publicado por Chae y col. (2010) donde analizaron el tejido sano y tumoral de 12 pacientes con CRC mediante NMR, encontrando un incremento en los niveles de taurina, glutamato y lactato mientras que la creatina, el malato y la glucosa descendieron de manera muy acusada.

3.2. La Metabolómica aplicada al estudio de cáncer de colon en cultivos celulares

Las muestras de sangre, orina y saliva son los fluidos biológicos más comunes en el análisis del metaboloma. Por otro lado, el extracto fecal ofrece la oportunidad de estudiar el metabolismo de la flora intestinal pero no indica necesariamente los metabolitos que se absorben por el organismo estudiado (Gibney y col., 2005). Además, el uso de otros biofluidos, como el líquido cefalorraquídeo, o de tejidos se caracteriza por ser invasivo y se prefiere evitar en la medida de lo posible. Sin embargo, el uso de cultivos celulares ofrece la posibilidad de investigar los efectos de nuevos fármacos, xenobióticos o ingredientes alimentarios sobre material biológico humano de forma más económica, y todo ello evitando importantes fuentes de error fruto de la heterogeneidad de las respuestas del organismo, hábitos (tabaco, ejercicio físico, etc), las interferencias ambientales y/o la alimentación de los individuos en estudio. Dicha heterogeneidad inter- e intra-individual afecta de modo dramático al metaboloma, puesto que los compuestos investigados responden a mínimas variaciones al ser intermediarios o productos producidos de forma dinámica en el metabolismo celular pudiendo sucederse reacciones en cadena y efectos inesperados. Por todo ello, los cultivos celulares constituyen un modelo de estudio muy adecuado en la investigación inicial de los efectos de componentes de la dieta al realizarse en unas condiciones altamente controladas.

El número de aplicaciones de cultivos celulares en la investigación del cáncer de colon representa una proporción importante del total de estudios metabolómicos. Las células humanas de cáncer de colon investigadas pertenecen fundamentalmente a las líneas SW y HT. La diferencia principal entre ambas líneas radica en las características de diferenciación celular. De forma general, la línea HT corresponde a células no diferenciadas, pudiendo estimular dicha diferenciación a enterocitos si se cultivan en ausencia de glucosa. Sin embargo, las células SW per-

manecen inmaduras independientemente de las condiciones de cultivo aplicadas. Existen diferencias también en cuanto a la morfología y la disposición celular dentro del cultivo. Ambos son modelos que se han utilizado desde hace más de veinte años en investigación y, por tanto, están bien establecidos y caracterizados (Chantret y col., 1988).

El primer estudio metabolómico en células de cáncer de colon (Zimmermann y col., 2007) se orientó hacia la caracterización detallada mediante huellas metabólicas de dichas células. Se compararon dos líneas celulares de cáncer de colon (SW-1116 y SW-480) con una sana (NCM-460) mediante GC-TOF MS, observando alteraciones en el metabolismo de los glicerofosfolípidos, en el metabolismo del ácido araquidónico, en la glucólisis y gluconeogénesis.

Los procesos por los que se lleva a cabo la diferenciación celular en cáncer de colon presentan un gran interés para la comunidad científica en la búsqueda y aplicación de tratamientos quimioterapéuticos, puesto que la diferenciación celular provoca una mayor especialización de las células y una menor invasividad. Uno de los tipos de fármacos que actúan en este sentido son los inhibidores de la histona desacetilasa (HDAC). En un estudio se caracterizaron y compararon los distintos mecanismos de acción de cuatro compuestos entre inhibidores (tricotostatina A y butirato) y no inhibidores (ácido cáprico y caprílico) de la HDAC sobre células HT-29, observando diferencias metabólicas en el consumo de la glucosa y el ciclo TCA, entre otros mecanismos celulares (Alcarraz-Vizán y col., 2010).

Dada la complejidad del metaboloma y el gran dinamismo al que está sometido, es importante un diseño óptimo de estos estudios como se ha comentado al principio de la sección 3. Una de las variables a tener en cuenta es el momento en el que se realizan los análisis de los metabolitos. En este sentido, Maddula y Baumbach (2011) demostraron que es importante tener en cuenta la fase del ciclo celular antes de la realización de análisis metabólicos. Para ello, inhibieron la transición celular en distintas fases del ciclo celular (G1/S y S) y observaron que en dichas fases el metabolismo energético era muy diferente. Mediante NMR determinaron que en la fase G1/S las células utilizaban como fuente principal de energía la glucólisis mientras que los intermediarios de biosíntesis energética procedían de la glutaminólisis, al contrario que en el caso de las células en fase S que utilizaban como fuente principal de energía la glutaminólisis y los intermediarios procedían de la glucólisis. Otro aspecto fundamental en el diseño del análisis del metaboloma es

la gran heterogeneidad cuali/cuantitativa del conjunto de metabolitos, descrita al principio de la sección 3. Teniendo en cuenta un aspecto fundamental en este sentido como es el tratamiento de la muestra, Simó y col. (2011) compararon cuatro extracciones de metabolitos ampliamente utilizadas en Metabolómica como son la extracción en fase sólida (usando un sorbente C18 convencional y otro, ABN, con una mayor capacidad de extracción de moléculas polares), la precipitación de proteínas con disolventes orgánicos (en este caso se usó metanol) y, por último, ultrafiltración mediante el uso de filtros de membrana de bajo peso molecular (en este trabajo se utilizaron filtros de 3 kDa). Una vez llevado a cabo el análisis metabolómico mediante CE-TOF MS de los cuatro extractos purificados, se determinó que la composición y cantidad de metabolitos detectados estaban íntimamente relacionadas con el tratamiento de la muestra y, por tanto, la elección del mismo condiciona los resultados metabolómicos y conclusiones de manera definitiva.

Recientemente, otros investigadores han aprovechado la facilidad de aplicación de ingredientes de la dieta a cultivos celulares para establecer los efectos de la misma siguiendo una aproximación Foodómica. Así, en un trabajo de investigación, Fernández-Arroyo y col. (2012) evaluaron los efectos de un extracto de aceite de oliva sobre dos líneas celulares (HT-29 y SW-480). El objetivo del estudio se basó en un análisis diana de los metabolitos fenólicos producidos por las células tras el tratamiento con dicho extracto mediante nanoLC-TOF MS. La oleuropeína y la aglicona junto con sus derivados se presentaron como posibles responsables de los efectos antiproliferativos sobre las células de cáncer de colon. Siguiendo con la determinación de los potenciales efectos antiproliferativos de ingredientes alimentarios, en un estudio reciente (Ibáñez y col., 2012b) se determinaron las diferencias a nivel molecular en células de cáncer de colon HT-29 cuya proliferación ya se había visto reducida tras la aplicación de un extracto polifenólico procedente de romero. Se analizaron los citosoles de dichas células siguiendo una estrategia no dirigida, mediante la determinación de la huella metabólica. Para ello se integraron los resultados de tres plataformas analíticas complementarias, concretamente CE-TOF MS, HILIC/UPLC-TOF MS y RP/UPLC-TOF MS. Entre las diferencias metabólicas encontradas en las células tratadas, se identificó un aumento de la relación entre el glutatión reducido y el oxidado, y una alteración significativa en el contenido en poliaminas y sus catabolitos. Con el fin de esclarecer dichos efectos a nivel celular, en un estudio posterior (Ibáñez y col., 2012a) se integraron los resultados fruto de los análisis metabolómicos con estudios transcriptó-

micos y proteómicos siguiendo una aproximación Foodómica global. Se observó la alteración significativa de 1308 genes, 17 proteínas y 65 metabolitos que fueron identificados. Usando el software "Ingenuity Pathway Analysis" se integraron las diferencias observadas en los datos metabolómicos y transcriptómicos, observándose alteración en el metabolismo del nitrógeno, el glutamato, el glutatión, la arginina y la prolina, y del ciclo de la urea y metabolismo de grupos amino.

4. CONCLUSIONES

Como se puede apreciar en la presente revisión bibliográfica, las técnicas ómicas han demostrado en los últimos años su gran potencial y aplicabilidad en investigaciones relacionadas con el cáncer de colon. En los artículos recogidos en el presente trabajo se observa una aplicación predominante en la búsqueda de nuevos biomarcadores que esclarezcan los procesos de progresión del cáncer de colon así como las intervenciones dietéticas para la prevención, promoción de la salud y recuperación de la homeostasis. El gran reto actual de la comunidad científica que se dedica a estudiar el efecto de los compuestos de la dieta a nivel molecular mediante diferentes técnicas ómicas, radica en la integración de los resultados obtenidos con estas nuevas tecnologías de manera eficiente, idealmente siguiendo una aproximación Foodómica. A largo plazo, esta integración promoverá la prevención de patologías a través de la administración de ingredientes beneficiosos de forma personalizada, mejorará nuestro conocimiento sobre la seguridad y calidad de los alimentos y ayudará a trasladar la identificación de biomarcadores con utilidad clínica a la práctica diagnóstica de rutina.

5. AGRADECIMIENTOS

CI y AV agradecen al MINECO las ayudas pre-doctorales FPI.

6. REFERENCIAS

- Ahmed, F. E. *J. Environ. Sci. Health C. Environ. Carcinog. Ecotoxicol. Rev.* (2004), 22, 91-147.
- Al-Shahrour, F., Minguez, P., Tárrega, J., Medina, I., Alloza, E., Montaner, D., Dopazo, J. *Nucleic Acids Res.* (2007), 35, W91-W96.
- Al-Shahrour, F., Minguez, P., Vaquerizas, J. M., Conde, L., Dopazo, J. *Nucleic Acids Res.* (2005), 33, W460-W464.
- Alcarraz-Vizán, G., Boren, J., Lee, W. N. P., Cascante, M. *Metabolomics* (2010), 6, 229-237.
- Alvaro, A., Solà, R., Rosales, R., Ribalta, J., Anguera, A., Masana, L., Vallvé, J. C. *IUBMB Life* (2008), 60, 757-764.
- Araujo, J. R., Goncalves, P., Martel, F. *Nutr. Res.* (2011), 31, 77-87.
- Aune, D., Chan, D. S. M., Lau, R., Vieira, R., Greenwood, D. C., Kampman, E., Norat, T., *Cancer Cause Control* (2012), 23, 521-535.
- Barczak, A., Rodriguez, M. W., Hanspers, K., Koth, L. L., Tai, Y. C., Bolstad, B. M., Speed, T. P., Erle, D. J. *Genome Res.* (2003), 13, 1775-1785.
- Bennink, M. R. "Dietary soy reduces colon carcinogenesis in human and rats - Soy and colon cancer" en *Nutrition and cancer prevention: new insights into the role of phytochemicals* (American Institute for Cancer Research Ed.) Springer, New York, EEUU (2011), p.11-17.
- Bermúdez-Soto, M. J., Larrosa, M., Garcia-Cantalejo, J. M., Espín, J. C., Tomás-Barberán, F. A., García-Conesa, M. T. *J. Nutr. Biochem.* (2007), 18, 259-271.
- Bertini, I., Cacciatore, S., Jensen, B. V., Schou, J. V., Johansen, J. S., Kruhoffer, M., Luchinat, C., Nielsen, D. L., Turano, P. *Cancer Res.* (2012), 72, 356-364.
- Bertucci, F., Salas, S., Eysteris, S., Nasser, V., Finetti, P., Ginestier, C., Charafe-Jauffret, E., Lloriod, B., Bachelart, L., Montfort, J., Victorero, G., Viret, F., Ollendorff, V., Fert, V., Giovaninni, M., Delperio, J. R., Nguyen, C., Viens, P., Monges, G., Birnbaum, D., Houlgatte, R. *Oncogene* (2004), 23, 1377-1391.
- Bobé, G., Murphy, G., Albert, P. S., Sansbury, L. B., Lanza, E., Schatzkin, A., Cross, A. J. *Int. J. Cancer* (2012), 130, 1649-1659.
- Brenner, S., Johnson, M., Bridgham, J., Golda, G., Lloyd, D. H., Johnson, D., Luo, S., McCurdy, S., Foy, M., Ewan, M., Roth, R., George, D., Eletr, S., Albrecht, G., Vermaas, E., Williams, S. R., Moon, K., Burcham, T., Pallas, M., DuBridge, R. B., Kirchner, J., Fearon, K., Mao, J., Corcoran, K. *Nat. Biotechnol.* (2000), 18, 630-634.
- Bu, Q., Huang, Y. N., Yan, G. Y., Cen, X. B., Zhao, Y. L. *Comb. Chem. High T. Scr.* (2012), 15, 266-275.
- Burton, G. R., McGehee, R. E. Jr. *Nutrition* (2004), 20, 109-114.
- Cai, F., Dupertuis, Y. M., Pichard, C. *Curr. Opin. Clin. Nutr.* (2012), 15, 99-106.
- Cardoso, J., Boer, J., Morreau, H., Fodde, R. *Biochim. Biophys. Acta* (2007), 1775, 103-137.
- Cellini, F., Chesson, A., Colquhoun, I., Constable, A., Davies, H. V., Engel, K. H., Gatehouse, A. M. R., Kärenlampi, S., Kok, E. J., Lengay, J. J., Lehesranta, S., Noteborn, H. P. J. M., Pedersen, J., Smith, M. *Food Chem. Toxicol.* (2004), 42, 1089-1125.

- Chae, Y. K., Kang, W. Y., Kim, S. H., Joo, J. E., Han, J. K., Hong B. W. *Korean Chem. Soc.* (2010), 31, 379-383.
- Chan, E. C., Koh, P. K., Mal, M., Cheah, P. Y., Eu K. W., Backshall, A., Cavill, R., Nicholson, J. K., Keun, H. C. *J. Proteome Res.* (2009), 8, 352-361.
- Chantret, I., Barbat, A., Dussaulx, E., Brattain, M. G., Zweibaum A. *Cancer Res.* (1988), 48, 1936-1942.
- Chen, G. C., Pang, Z., Liu, Q. F. *Eur. J. Clin. Nutr.* (2012), 66, 1182-1186.
- Cheng, Y., Xie, G., Chen, T., Qiu, Y., Zou, X., Zheng, M., Tan, B., Feng, B., Dong, T., He, P., Zhao, L., Zhao, A., Xu, L. X., Zhang, Y., Jia, W. J. *Proteome Res.* (2012), 3, 1354-1363.
- Chu, L., Scharf, E., Kondo, T. *Genome Inform.* (2001), 12, 227-229.
- Churchill, G. A. *Nat. Genet.* (2002), 32, 490-495.
- Cifuentes, A. *J. Chromatogr. A* (2009), 1216, 7109.
- Dahlquist, K. D., Salomonis, N., Vranizan, K., Lawlor, S. C., Conklin, B. R. *Nat. Genet.* (2002), 31, 19-20.
- Davis, V. W., Bathe, O. F., Schiller, D. E., Slupsky, C. M., Sawyer, M. B. *J. Surg. Oncol.* (2011), 103, 451-459.
- Denkert, C., Budczies, J., Weichert, W., Wohlgemuth, G., Scholz, M., Kind, T., Niesporek, S., Noske, A., Buckendahl, A., Dietel, M., Fiehn, O. *Mol. Cancer* (2008), 18, 7-72.
- Dombkowski, A. A., Thibodeau, B. J., Starcevic, S. L., Novak, R. F. *FEBS Lett.* (2004), 560, 120-124.
- Duggan, D. J., Bittner, M., Chen, Y., Meltzer, P., Trent, J. M. *Nat. Genet.* (1999), 21, 10-14.
- Egan, A. N., Schlueter, J., Spooner, D. M. *Am. J. Bot.* (2012), 99, 175-185.
- Feng, B., Yue, F., Zheng, M. H., "Urinary markers in colorectal cancer" en *Advances In Clinical Chemistry* (G. S. Makowski Ed), Academic Press, Farmington, EEUU (2009), p. 45-57.
- Fernández-Arroyo, S., Gómez-Martínez, A., Rocamora-Reverte, L., Quirantes-Piné, R., Segura-Carretero, A., Fernández-Gutiérrez, A., Ferragut, J. A. *J. Pharmaceut. Biomed.* (2012), 63, 128-134.
- Fiehn, O. *Plant Mol. Biol.* (2002), 48, 155-171.
- Gaj, S., Eijssen, L., Mensink, R. P., Evelo, C. T. *Genes Nutr.* (2008), 3, 153-157.
- García-Cañas, V., Simó, C., Herrero, M., Ibáñez, E., Cifuentes A. *Anal. Chem.* (2012), 84, 10150-10159.
- García-Cañas, V., Simó, C., León, C., Cifuentes, A. *J. Pharm. Biomed.* (2010), 51, 290-304.
- Gerber, M. *Brit. J. Nutr.* (2012), 107, S228-S239.
- Gibney, M. J., Walsh, M., Brennan, L., Roche, H. M., German, B., van Ommen, B. *Am. J. Clin. Nutr.* (2005), 82, 497-503.
- González-Sarrías, A., Espín, J. C., Tomás-Barberán, F. A., García-Conesa, M. T. *Mol. Nutr. Food Res.* (2009), 53, 686-698.
- Gorham, E. D., Garland, C. F., Garland, F. C., Grant, W. B., Mohr, S. B., Lipkin, M., Newmark, H. L., Giovannucci, E., Wei, M., Holick, M. F. *J. Steroid. Biochem.* (2005), 97, 179-194.
- Gunderson, K. L., Kruglyak, S., Graige, M. S., Garcia, F., Kermani, B. G., Zhao, C., Che, D., Dickinson, T., Wickham, E., Bierle, J., Doucet, D., Milewski, M., Yang, R., Siegmund, C., Haas, J., Zhou, L., Oliphant, A., Fan, J. B., Barnard, S., Chee, M. S. *Genome Res.* (2004), 14, 870-877.
- Hansen, L., Skeie, G., Landberg, R., Lund, E., Palmqvist, R., Johansson, I., Dragsted, L. O., Egeberg, R., Johnsen, N. F., Christensen, J., Overvad, K., Tjonneland, A., Olsen, A. *Int. J. Cancer* (2012), 131, 469-478.
- Hawkins, R. D., Hon, G. C., Ren, B. *Nat. Rev. Genet.* (2010), 11, 476-486.
- Hartmann, M., Baumbach, J., Nolte, J., Moyer, M., Zimmermann, D. *Ann. Oncol.* (2006), 17, 36-36.
- Herrero, M., García-Cañas, V., Simó, C., Cifuentes, A. *Electrophoresis* (2010), 31, 205-228.
- Herrero, M., Simó, C., García-Cañas, V., Ibáñez, E., Cifuentes, A. *Mass Spectrom. Rev.* (2011), DOI: 10.1002/mas.
- Hirayama, A., Kami, K., Sugimoto, M., Sugawara, M., Toki, N., Onozuka, H., Kinoshita, T., Saito, N., Ochiai, A., Tomita, M., Esumi, H., Soga, T. *Cancer Res.* (2009), 1, 4918-4925.
- Hughes, T. R., Mao, M., Jones, A. R., Burchard, J., Marton, M. J., Shannon, K. W., Lefkowitz, S. M., Ziman, M., Schelter, J. M., Meyer, M. R., Kobayashi, S., Davis, C., Dai, H., He, Y. D., Stephanians, S. B., Cavet, G., Walker, W. L., West, A., Coffey, E., Shoemaker, D. D., Stoughton, R., Blanchard, A. P., Friend, S. H., Linsley, P. S. *Nat. Biotechnol.* (2001), 19, 342-347.
- Ibáñez, C., Valdés, A., García-Cañas, V., Simó, C., Celebier, M., Rocamora-Reverte, L., Gómez-Martínez, A., Herrero, M., Castro-Puyana, M., Segura-Carretero, A., Ibáñez, E., Ferragut, J. A., Cifuentes, A. *J. Chromatogr. A* (2012a), 1248, 139-153.
- Ibáñez, C., Simó, C., García-Cañas, V., Gómez-Martínez, A., Ferragut, J. A., Cifuentes, A. *Electrophoresis* (2012b), 33, 2328-2336.
- Johnson, J. J. *Cancer Lett.* (2011), 305, 1-7.
- Jones, D. P., Park, Y., Ziegler, T. R. *Annu Rev Nutr.* (2012), 32, 183-202.
- Key, T. J., Appleby, P. N., Masset, G., Brunner, E. J., Cade, J. E., Greenwood, D. C., Stephen, A. M., Kuh, D., Bhaniani, A., Powell, N., Khaw, K. T. *Int. J. Cancer* (2012), 131, E320-E325.
- Kim, Y. S., Maruvada, P., Milner, J. A. *Future Oncol.* (2008), 4, 93-102.

- King, A. A., Shaughnessy, D. T., Mure, K., Leszczynska, J., Ward, W. O., Umbach, D. M., Xu, Z., Ducharme, D., Taylor, J. A., Demarini, D. M., Klein, C. B. *Mutat. Res.* (2007), 616, 60-69.
- Kondo, Y., Nishiumi, S., Shinohara, M., Hatano, N., Ikeda, A., Yoshie, T., Kobayashi, T., Shiomi, Y., Irino, Y., Takenawa, T., Azuma, T., Yoshida, M. *Biomark Med.* (2011), 5, 451-460.
- Lee, S. H., Yamaguchi, K., Kim, J. S., Eling, T. E., Safe, S., Park, Y., Baek, S. J. *Carcinogenesis* (2006), 27, 972-981.
- Leichtle, A. B., Nuoffer, J. M., Ceglarek, U., Kase, J., Conrad, T., Witzigmann, H., Thiery, J., Fiedler, G. M. *Metabolomics* (2012), 8, 643-653.
- Lipshutz, R. J., Fodor, S. P., Gingeras, T. R., Lockhart, D. *J. Nat. Genet.* (1999), 21, 20-24.
- Llorach, R., Garcia-Aloy, M., Tulipani, S., Vazquez-Fresno, R., Andres-Lacueva, C. *J. Agr. Food Chem.* (2012), 60, 8797-8808.
- Ludwig, C., Ward, D. G., Martin, A., Viant, M. R., Ismail, T., Johnson, P. J., Wakelam, M. J., Günther, U. L. *Magn. Reson. Chem.* (2009), 47, S68-S73.
- Lunec, J., Halligan, E., Mistry, N., Karakoula, K. *Ann. N. Y. Acad. Sci.* (2004), 1031, 169-183.
- Ma, Y. L., Liu, W. J., Peng, J. Y., Zhang, P., Chen, H. Q., Qin, H. L. *Zhonghua Wei Chang Wai Ke Za Zhi.* (2009a), 12, 386-390.
- Ma, Y. L., Qin, H. L., Liu, W. J., Peng, J. Y., Huang, L., Zhao, X. P., Cheng, Y. *Dig Dis Sci.* (2009b), 54, 2655-2662.
- Ma, Y. L., Liu, W. J., Peng, J. Y., Huang, L., Zhang, P., Zhao, X. P., Chen, Y., Qin, H. L. *Mol. Biol. Rep.* (2010), 37, 1403-1411.
- Maddula, S., Baumbach, J. J. *Metabolomics* (2011), 7, 509-523.
- Maitra, R. D., Kim, J., Dunbar, W. B. *Electrophoresis* (2012), DOI: 10.1002/elps.201200272.
- Mal, M., Koh, P. K., Cheah, P. Y., Chan, E. C. Y. *Anal. Bioanal. Chem.* (2012), 403, 483-493.
- Mardis, E. R. *Annu. Rev. Genomics Hum. Genet.* (2008), 9, 387-402.
- Mardis, E. R., Wilson, R. K. *Hum. Mol. Genet.* (2009), 18, R163-R168.
- Mariadason, J. M., Corner, G. A., Augenlicht, L. H. *Cancer Res.* (2000), 60, 4561-4572.
- Markuszewski, M. J., Struck, W., Waszczuk-Jankowska, M., Kaliszan, R. *Electrophoresis* (2010), 31, 2300-2310.
- McLoughlin, P., Roengvoraphoj, M., Gissel, C., Hescheler, J., Certa, U., Sachinidis, A. *Genes Cells* (2004), 9, 661-669.
- Metzker, M. L. *Nat. Rev. Genet.* (2010), 11, 31-46.
- Monleón, D., Morales, J. M., Barrasa, A., López, J. A., Vázquez, C., Celda, B. *NMR Biomed.* (2009), 22, 342-348.
- Morozova, O., Marra, M. A. *Genomics* (2008), 92, 255-264.
- Murtaza, I., Marra, G., Schlapbach, R., Patrignani, A., Künzli, M., Wagner, U., Sabates, J., Dutt, A. *Biotechnol. Appl. Biochem.* (2006), 45, 29-36.
- Nagrath, D., Caneba, C., Karedath, T., Bellance, N. *BBA-Bioenergetics* (2011), 1807, 650-663.
- Nambiar, P. R., Boutin, S. R., Raja, R., Rosenberg, D. W. *Vet. Pathol.* (2005), 42, 735-752.
- Nambiar, P. R., Gupta, R. R., Misra, V. *Mutat. Res.* (2010), 693, 3-18.
- Narayanan, B. A., Narayanan, N. K., Simi, B., Reddy, B. S. *Cancer Res.* (2003), 63, 972-979.
- Ng, D. J. Y., Pasikanti, K. K., Chan, E. C. Y. *Metabolomics* (2011), 7, 155-178.
- Nicholson, J. K., Lindon, J. C., Holmes, E. *Xenobiotica* (1999), 29, 1181-1189.
- Niculescu, M. D., Pop, E. A., Fischer, L. M., Zeisel, S. H. *J. Nutr. Biochem.* (2007), 18, 380-390.
- Nishiumi, S., Kobayashi, T., Ikeda, A., Tomoo, Y., Megumi, K., Yoshihiro I., Tatsuya, O., Nobuhide, H., Seiji, K., Tadaomi, T., Takeshi, A., Masaru, Y. *PLoS ONE* (2012), 7, e40459.
- Noé, V., Peñuelas, S., Lamuela-Raventós, R. M., Permanyer, J., Ciudad, C. J., Izquierdo-Pulido, M. *J. Nutr.* (2004), 134, 2509-2516.
- O'Connell, T. M., *Bioanalysis* (2012), 4, 431-451.
- Okoniewski, M. J., Miller, C. J. *BMC Bioinformatics* (2006), 7, 276.
- Oleaga, C., Ciudad, C. J., Noé, V., Izquierdo-Pulido, M. *Oxid. Med. Cell Longev.* (2012), DOI: 10.1155/2012/390385.
- Pellis, L., Dommels, Y., Venema, D., Polanen, A., Lips, E., Baykus, H., Kok, F., Kampman, E., Keijer, J. *Br. J. Nutr.* (2008), 99, 703-708.
- Pool-Zobel, B. L., Selvaraju, V., Sauer, J., Kautenburger, T., Kiefer, J., Richter, K. K., Soom, M., Wölfl, S. *Carcinogenesis* (2005), 26, 1064-1076.
- Putala, H., Mäkiyuokko, H., Tiihonen, K., Rautonen, N. *Mol. Cell Biochem.* (2011), 357, 235-245.
- Ramakrishnan, R., Bao, P., Müller, U. R. "High Sensitivity Expression Profiling" en *Microarray Technology and Its Applications* (U.R. Müller et al. Eds.) Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2005), pp. 229-244.
- Qiu, Y., Cai, G., Su, M., Chen, T., Liu, Y., Xu, Y., Ni, Y., Zhao, A., Cai, S., Xu, L. X., Jia, W. *J Proteome Res.* (2010), 9, 1627-1634.
- Rao, A., Janezic, S., *Nutr. Cancer* (1992), 18, 43-52.



El sistema de Cromatografía Líquida Triple Cuadrupolo EVOQ (LC-TQ) se ha diseñado con un objetivo – Cuantificar de forma fiable miles de muestras reales en el menor tiempo posible del análisis al informe de resultados-. Proporciona una excepcional sensibilidad, precisión, exactitud, linealidad y rango dinámico para sus métodos con múltiples transiciones (MRM). Las innovaciones en el Software y la nueva tecnología de Ionización a Presión Atmosférica (API) lo convierten en un **salto adelante** para la cuantificación en rutina a altísima sensibilidad.

- Alta eficacia en la ionización con las sondas VIP y APCI
- UHPLC, HPLC o módulos OLE con horno y desgasificador
- Máxima sensibilidad MRM con analizador sin lentes
- Sintonización plana, sin ajustes con diseño de doble embudo IQ
- Interfase de orificio para alta sensibilidad y máxima robustez
- Software PACER alta productividad en la revisión de resultados

Visite www.evoqms.com para más información
 Consultas a info-bcad-spain@bruker.com

Presentamos el
EVOQ Qube
 y el
EVOQ Elite
LC-TQ
 de Bruker

MASS SPECTROMETRY

Innovation with Integrity



- Rebhan, M., Chalifa-Caspi, V., Prilusky, J., Lancet, D. *Trends Genet.* (1997), 13, 163.
- Reddy, L., Odhav, B., Bhoola, K. D. *Pharm. Therap.* (2003), 99, 1-13.
- Ritchie, S., Ahiahonu, P. W. K., Jayasinghe D., Heath, D., Liu, J., Lu, Y., Jin, W., Kavianpour, A., Yamazaki, Y., Khan, A. M., Hossain, M., Su-Myat, K. K., Wood, P. L., Krenitsky, K., Takemasa I., Miyake, M., Sekimoto, M., Monden, M., Matsubara, H., Nomura, F., Goodenowe, D. B. *BMC Med.* (2010), 8, 13.
- Rudolf, E., Anelova, H., Cervinka, M. *Anti-Cancer Agent Me.* (2007), 7, 559-575.
- Sant, M., Allemani, C., Sieri, S., Krogh, V., Menard, S., Tagliabue, E., Nardini, E., Micheli, A., Crosignani, P., Muti, P., Berrino, F. *Int. J. Cancer* (2007), 121, 911-914.
- Serretti, A., Olgiati, P., De Ronchi, D. *J. Alzheimers Dis.* (2007), 12, 73-92.
- Simó, C., Ibáñez, C., Gómez-Martínez, A., Ferragut, J. A., Cifuentes, A. *Electrophoresis* (2011), 32, 1765-1777.
- Stafford, P. "Data Normalization Selection" en *Microarray Innovations: Technology and Experimentation* (G. Hardiman Ed.) CRC Press, Boca Raton, FL, 2009, pp. 97-117.
- Storhoff, J. J., Marla, S. S., Garimella, V., Mirkin, C. A. "Labels and Detection Methods" en *Microarray Technology and its Applications* (U.R. Müller et al. Eds.) Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2005), pp. 147-180.
- Subramanian, A., Tamayo, P., Mootha, V. K., Mukherjee, S., Ebert, B. L., Gillette, M. A., Paulovich, A., Pomeroy, S. L., Golub, T. R., Lander, E. S., Mesirov, J. P. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (2005), 102, 15545-15550.
- Tavani, A., Malerba, S., Pelucchi, C., Dal Maso, L., Zucchetto, A., Serraino, D., Levi, F., Montella, M., Franceschi, S., Zambon, A., La Vecchia, C. *Ann. Oncol.* (2012), 23, 2737-2742.
- Tessem, M. B., Selnaes, K. M., Sjursen, W., Trano, G., Giskeodegard, G. F., Bathen, T. F., Gribbestad, I. S., Hofslí, E. *J. Proteome Res.* (2010), 9, 3664-3670.
- Thomas, P. D., Kejariwal, A., Campbell, M. J., Mi, H., Diemer, K., Guo, N., Ladunga, I., Ulitsky-Lazareva, B., Muruganujan, A., Rabkin, S., Vandergriff, J. A., Doremieux, O. *Nucleic Acids Res.* (2003), 31, 334-341.
- Thomson, J. F., Oliver, J. S. *Electrophoresis* (2012), DOI: 10.1002/elps.201200136.
- Trachtenberg, A. J., Robert, J. H., Abdalla, A. E., Fraser, A., He, S. Y., Lacy, J. N., Rivas-Morello, C., Truong, A., Hardiman, G., Ohno-Machado, L., Liu, F., Hovig, E., Kuo, W. P. *Methods Mol. Biol.* (2012), 802, 3-17.
- Valdés, A., Simó, C., Ibáñez, C., Rocamora-Reverte, L., Ferragut, J. A., García-Cañas, V., Cifuentes, A. *Electrophoresis* (2012a), 33, 2314-2327.
- Valdés, A., García-Cañas, V., Rocamora-Reverte, L., Gómez-Martínez, Á, Ferragut, J. A., Cifuentes, A. *Genes Nutr.* (2012b), DOI: 10.1007/s12263-012-0311-9.
- Van Erk, M. J., Roepman, P., Van der Lende, T. R., Stierum, R. H., Aarts, J. M., Van Bladeren, P. J., Van Ommen, B. *Eur. J. Nutr.* (2005), 44, 143-156.
- Van Erk, M. J., Teuling, E., Staal, Y. C., Huybers, S., Van Bladeren, P. J., Aarts, J. M., Van Ommen, B. *J. Carcinog.* (2004), 3, 8.
- Veeriah, S., Kautenburger, T., Habermann, N., Sauer, J., Dietrich, H., Will, F., Pool-Zobel, B. L. *Mol. Carcinog.* (2006), 45, 164-174.
- Veeriah, S., Miene, C., Habermann, N., Hofmann, T., Klenow, S., Sauer, J., Böhmer, F., Wöfl, S., Pool-Zobel, B. L. *Int. J. Cancer* (2008), 15, 2647-2655.
- Velculescu, V. E., Zhang, L., Vogelstein, B., Kinzler, K. W. *Science* (1995), 270, 484-487.
- Visanji, J. M., Thompson, D. G., Padfield, P. J. *Cancer Lett.* (2006), 237, 130-136.
- Wang, H., Tso, V. K., Slupsky, C. M., Fedorak, R. N. *Future Oncol.* (2010), 6, 1395-1406.
- Wang, H., Schiller, D. E., Tso, V. K., Slupsky, C. M., Wong, C. K., Fedorak, R. N. *Gastroenterology* (2011), 140, S-40.
- Wang, Z., Gerstein, M., Snyder, M. *Nat. Rev. Genet.* (2009), 10, 57-63.
- Wang, Z. J., Joshi, A. M., Ohnaka, K., Morita, M., Toyomura, K., Kono, S., Ueki, T., Tanaka, M., Kakeji, Y., Maehara, Y., Okamura, T., Ikejiri, K., Futami, K., Maekawa, T., Yasunami, Y., Takenaka, K., Ichimiya, H., Terasaka, R. *Nutr. Cancer* (2012), 64, 798-805.
- Wark, P. A., Lau, R., Norat, T., Kampman, E. *Am. J. Clin. Nutr.* (2012), 96, 622-631.
- Wilhelm, B. T., Landry, J. R. *Methods* (2009), 48, 249-257.
- Williams, C. D., Satia, J. A., Adair, L. S., Stevens, J., Galanko, J., Keku, T. O., Sandler, R. S. *Nutr. Cancer* (2010), 62, 701-709.
- Wu, S. J., Feng, B., Li, K., Zhu, X., Liang, S. H., Liu, X. F., Han, S., Wang, B. L., Wu, K. C., Miao, D. M., Liang, J., Fan, D. M. *Am. J. Med.* (2012), 125, 551-559.
- Yoshie, T., Nishiumi, S., Izumi, Y., Sakai, A., Inoue, J., Azuma, T., Yoshida, M. *Cancer Sci.* (2012), 103, 1010-1021.
- Zimmermann, D., Hartmann, M., Moyer, M. P., Nolte, J., Baumbach, J. I. *Metabolomics* (2007), 3, 13-17.

NOTICIAS DE LA SECyTA

XII REUNIÓN CIENTÍFICA DE LA SECyTA (41ª REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

La XII Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (41ª Reunión del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines) se celebró del **14 al 16 de noviembre de 2012** en el moderno y céntrico Palau de Fires i Congressos de Tarragona. Esta reunión fue organizada por la Universidad Rovira i Virgili de Tarragona, siendo Rosa M^a Marcé la presidenta del Comité Organizador.

Esta reunión tuvo como objetivo principal la presentación de nuevos desarrollos e innovaciones en el campo de la cromatografía y las técnicas afines y sus aplicaciones a campos tan amplios y variados como los análisis clínicos y farmacéuticos, el análisis de alimentos, el medio ambiente, las técnicas ómicas o a los nuevos desarrollos de tratamientos de muestras o de la instrumentación, sin olvidar los fundamentos de la cromatografía, los procesos industriales o la quimiometría como áreas de trabajo.

El congreso contó con 214 asistentes de entre los que son de destacar las 55 becas y ayudas concedidas a estudiantes que presentaron trabajos de investigación. El programa científico contó con 3 conferencias plenarios, 4 conferencias invitadas, 38 comunicaciones orales, 148 comunicaciones en formato de cartel, 2 sesiones de discusión de los carteles previamente seleccionados, 5 seminarios comerciales, 1 mesa redonda sobre el papel de la cromatografía en la industria y, además, la 12ª Asamblea General de la SECyTA, que se celebró el día 15 por la tarde.

Dentro del amplio programa científico, son de resaltar las conferencias plenarios presentadas por prestigiosos ponentes internacionales, cuyos títulos fueron:

Multidimensional analysis of environmental pollutants using lab on chip technologies, presentada por el **Prof. Alastair Lewis**, National Centre for Atmospheric Science, University of York, UK.

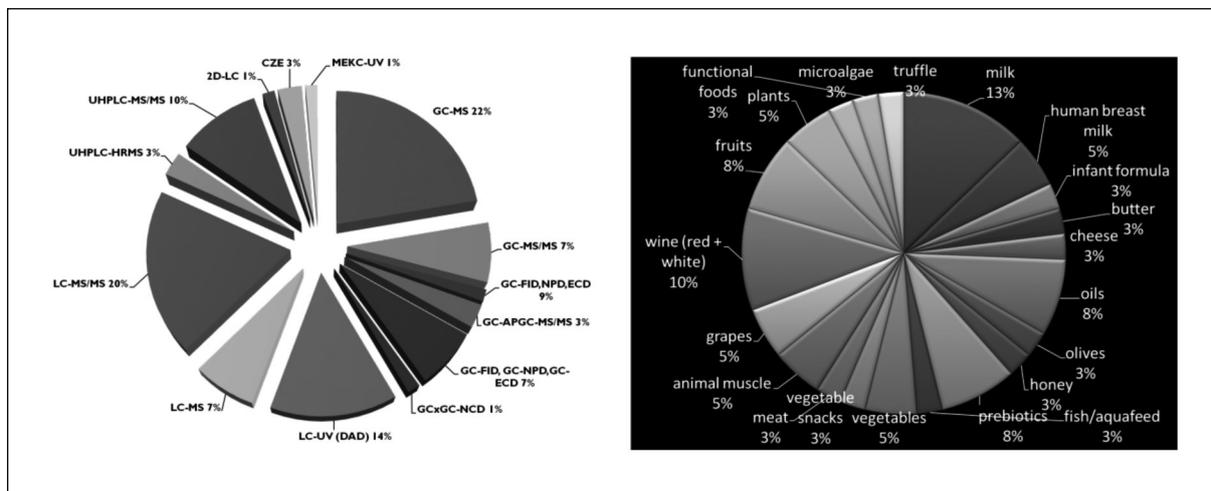
Metabolomics of biofluids: from a metabolite to a phenotype, presentada por el **Dr. Oleg. A. Mayboroda**, Leiden University Medical Centre (LUMC), The Netherlands.

New developments in hydrophilic interaction chromatography, presentada por el **Dr. David McCalley**, University of the West of England, UK.

De igual interés fueron las conferencias invitadas que corrieron a cargo de muy reconocidos investigadores españoles, como el **Prof. Joan Grimalt**, (Institut de Diagnosi Ambiental i Estudis de l'Aigua del CSIC de Barcelona) con el título *How analytical chemistry can describe climate change*, el **Prof. Agustín Costa** (Universidad de Oviedo) con el título *ME-ED, a portable analytical tool*; el **Prof. Juan Vicente Sancho**, (Universitat Jaume I de Castelló), cuyo título fue *Screening of herbal blends for legal highs by UHPLC-QTOFMS*; y el **Prof. Vicente Ferreira** (Universidad de Zaragoza) con el título *Major analytical challenges in the interpretation of aroma and flavour*.

En las sesiones paralelas de carteles que tuvieron lugar el último día, los moderadores llevaron a cabo una labor muy prolija e hicieron un balance de los trabajos presentados, agrupándolos por áreas de trabajo, tratamiento de muestras, compuestos objeto de estudio, matrices analizadas y técnicas analíticas (estos dos últimos mostrados en la figura), seleccionando aquéllos que consideraron de mayor interés para comentarlos con los autores y los asistentes en debate abierto. Tanto en una como en otra sesión quedó de manifiesto el incremento de la aplicación de la cromatografía líquida en los últimos años y cómo la espectrometría de masas es la técnica de identificación más empleada, aunque detectores más convencionales como el ECD, FID o NPD siguen en perfecta vigencia en determinaciones concretas.

Esta reunión ha contado también con una exposición comercial en la que han participado varias de las empresas más punteras en el sector de la instrumentación analítica, o bien han contribuido patrocinando alguna ponencia, como Agilent, Micrón, Scharlab, Thermo, Waters, Leco, Perkin Elmer y Vertex. No cabe duda de que éste es un buen foro para acercar a los usuarios a los nuevos productos o las novedades en instrumentación y ponerlos en contacto con las casas comerciales.



Como viene siendo una tradición, durante la ceremonia de clausura de la reunión, el día 16 de noviembre se hizo entrega de los VIII Premios “José Antonio García Domínguez” patrocinados por Bruker Chemical Analysis a las comunicaciones orales y carteles más destacados a juicio del jurado constituido a tal efecto. De igual manera, la empresa Sigma Aldrich entregó el accésit del premio “Club de usuarios de SPME” del que ya se cumple la sexta edición.

En paralelo se ha desarrollado un programa social que obtuvo una magnífica acogida entre los asistentes y que incluyó una muy detallada y amena visita guiada al conjunto arqueológico de la Tarraco Romana, proclamado Patrimonio Mundial por la Unesco en el año 2000 y que culminó con la exhibición de unos castells (torres humanas) a cargo de una colla castellera de la ciudad que fue la admiración de todos. Por otra parte, la cena de gala tuvo lugar en una masía del siglo XII

situada en La Canonja, a unos 20 minutos de la ciudad de Tarragona, en un amplio espacio para poder departir y disfrutar de una cena muy celebrada por todos los comensales.

Hay que resaltar, como muy bien se reflejó en la clausura de la reunión, la alta calidad de los trabajos presentados, la variedad y multidisciplinariedad de los temas abordados, la alta participación de estudiantes becados por la SECyTA que han tenido ocasión de entrar en contacto con investigadores de su mismo campo o a los que se les han abierto oportunidades de colaboración en campos afines y, muy especialmente, la excelente labor del comité organizador que hizo que todo estuviera en perfecta coordinación y discurriera con gran agilidad. Sin duda, un éxito.

Mario Fernández Martín
Instituto de Química Orgánica General (CSIC)

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



VIII EDICIÓN PREMIOS JOSÉ ANTONIO GARCÍA DOMÍNGUEZ

En el marco de la XII Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) celebrada en Tarragona del 14 al 16 de noviembre de 2012 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 VIII 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 (Presidente), Francesc Borrull, Mercedes de Frutos, María Teresa Galcerán y Begoña Jiménez, 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: OP-13

Título: UNAMBIGUOUS CONFIRMATION OF CYCLIC IMINES AS EMERGING TOXINS IN SHELLFISH HAVERING AREAS OF CATALONIA (NW MEDITERRANEAN SEA)

Autores: *M. García-Altres*¹, *V. Bane*², *A. Casanova*¹, *J. Diogène*¹, *A. Furey*², *P. de la Iglesia*¹

¹ IRTA, Sant Carles de la Ràpita, Spain

² Department of Chemistry, Proteobio, Mass Spectrometry Centre for Proteomics and Biotoxin Research, Cork, Ireland

2^o Premio ex-aequo a la mejor Comunicación Oral (300 euros)

Comunicación: OP-14

Título: TRANSIENTS ISOTACHOPHORESIS OF PROTEINS ON GLASS MICROCHIP WITH LASER INDUCED FLUORESCENCE DETECTION

Autores: *A.G. Crevillén*, *M.M. Barrios-Romero*, *M. de Frutos*, *J.C. Díez-Masa*

Institute of General Organic Chemistry, CSIC, Madrid, Spain

2^o Premio ex-aequo a la mejor Comunicación Oral (300 euros)

Comunicación: OP-38

Título: EVALUATION OF DIFFERENT POLAR COATINGS FOR STIR BAR SORPTIVE EXTRAC-

TION OF EMERGING POLLUTANTS FROM ENVIRONMENTAL WATER SAMPLES

Autores: *N. Gilart*, *N. Miralles*, *P.A.G. Cormack*, *R.M. Marcé*, *F. Borrull*, *N. Fontanals*

Department of Analytical Chemistry and Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Rovira i Virgili University, Tarragona, Spain

En el caso de los premios a las mejores comunicaciones tipo cartel presentadas en la XII Reunión Científica de la SECyTA, el jurado estuvo constituido por: Fco. Javier Santos (Presidente), Belén Gómara, Elena Ibáñez y Yolanda Picó. Este jurado tomó por unanimidad los siguientes acuerdos:

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

Comunicación: NDE-05

Título: ANALYSIS OF ANABOLIC STEROIDS IN URINE BY GC-APGC-MS/MS (QqQ AND QTOF). POTENTIAL USE FOR DOPING CONTROL

Autores: *M. Raro*¹, *T. Portolés*¹, *J.V. Sancho*¹, *E. Pitarch*¹, *F. Hernández*¹, *J. Marcos*², *R. Ventura*², *O.J. Pozo*², *J. Segura*²

¹ Research Institute for Pesticides and Water, University Jaume I. Castellón, Spain

² Bioanalysis Research Group. IMIM, Hospital del Mar. Barcelona, Spain

2^o Premio al mejor Póster (300 euros)

Comunicación: ENV-42

Título: DETERMINATION OF ILLICIT DRUGS IN WATER SAMPLES BY COUPLING IN-LINE SOLID-PHASE EXTRACTION AND CAPILLARY ELECTROPHORESIS

Autores: *T. Baciú*, *F. Borrull*, *M. Calull*, *C. Aguilar*

Department of Analytical Chemistry and Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Rovira i Virgili University, Tarragona, Spain

La entrega de los premios tuvo lugar el 16 de noviembre de 2012, durante la ceremonia de clausura de la XII Reunión Científica de la SECyTA.

Belén Gómara

Secretaria de la SECyTA

1^{er} Premio a la mejor Comunicación Oral**UNAMBIGUOUS CONFIRMATION OF CYCLIC IMINES AS EMERGING TOXINS IN SHELLFISH HARVESTING AREAS OF CATALONIA (NW MEDITERRANEAN SEA)**

M. García-Altres¹, V. Bane², A. Casanova¹, J. Diogène¹, A. Furey², P. de la Iglesia¹

Cyclic imines are a group of lipophilic marine toxins that can be bioaccumulated in seafood. They comprise three main types of toxins (spiroptides, gymnodimines and pinnatoxins) that have several spiro-linked functional groups and an imino group in their structure ^[1]. Although their fast-acting neurotoxicity in mice, there are no regulatory limits for cyclic imines in shellfish because these toxins have not been directly linked to human intoxication. Therefore, the European Food Safety Authority (EFSA) performed a risk assessment to human health related to the consumption of shellfish contaminated with cyclic imines, but it was not conclusive due to the lack of data about the occurrence of these toxins in seafood ^[2].

This work presents the first detection of spiroptides and pinnatoxins in shellfish sampled in Catalonia (Spain, NW Mediterranean Sea). Spiroptides were first detected in the Atlantic coast of Spain (Galicia region) in 2006 ^[3], but to the best of our knowledge, the presence of pinnatoxins in Spanish shellfish has never been reported. These two toxins have been also detected in sea water using solid-phase adsorption toxin tracking devices (SPATTs) ^[4]. The detection by LC-MS/MS of spiroptides and pinnatoxins was performed under alkaline chromatographic conditions using a QTrap 3200 hybrid triple quadrupole (AB/Sciex). The further identification of the compounds was performed in an 6340 Ion Trap (Agilent) and in an Orbitrap Discovery (Thermo Scientific). The complementation of these mass spectrometric techniques provided the optimum sensitivity, resolution and mass accuracy to quantify, characterize and unequivocally identify these new emerging marine toxins in Catalonian samples. The results of this work support the requests of EFSA to include cyclic imines in the shellfish safety monitoring programs to collect exposure data of cyclic imines to consumers, required to perform accurate assessments of the risk posed by cyclic imines in seafood.

^[1] A. Otero, M.-J. Chapela, M. Atanassova, J.M. Vieites, A.G. Cabado, Chemical Research in Toxicology 24(11) (2011) 1817.

^[2] EFSA Panel on Contaminants in the Food Chain (CONTAM), EFSA Journal 8 (6) (2010) 1628.

^[3] A. Villar Gonzalez, M. L. Rodriguez-Velasco, B. Ben-Gigirey, L. M. Botana, Toxicon 48(8) (2006) 1068.

^[4] L. A. MacKenzie, Current Opinion in Biotechnology 21(3) (2010) 326.

1^{er} Premio al mejor Póster (400 euros): comunicación NDE-05**ANALYSIS OF ANABOLIC STEROIDS IN URINE BY GC-APGC-MS/MS (QqQ AND QTOF). POTENTIAL USE FOR DOPING CONTROL**

M. Raro¹, T. Portolés¹, J.V. Sancho¹, E. Pitarch¹, F. Hernández¹, J. Marcos², R. Ventura², O. J. Pozo², J. Segura²

Exogenous androgenic anabolic steroids (AAS) are synthetic derivatives of testosterone with a common structure which contains four rings. The use of AAS can stimulate the formation of muscle cells, increasing the muscle growth. For this reason, they are widely used for athletic performance. Since their first prohibition in 1976 ^[1], they remain as the most frequently detected group of substances in doping control analyses ^[2]. Therefore, doping control laboratories have to develop adequate analytical approaches for the detection of AAS misuse. Most of AAS are quickly metabolized after human administration. Thus, AAS metabolites are the most suitable biomarkers for the screening of AAS.

Due to the fact that their use by athletes is prohibited at any time, the mere presence of one of their metabolites in urine is enough to declare an adverse analytical finding. Consequently, any improvement in the detection of AAS is important for the doping control field. Analytical methodologies using chromatographic techniques coupled to tandem mass spectrometry with triple quadrupole (QqQ) are the most adequate approaches for the determination of AAS or their metabolites in urine samples due to their excellent sensitivity and selectivity. At the moment, doping control laboratories are using two strategies for the detection of AAS: methods based on LC-MS using atmospheric pressure interface (API) and GC-MS methods using electron ionization (EI). LC-API-MS methods allow for the reduction of sample treatment and the possibility of detecting thermolabile compounds. However, only those compounds with an ionisable centre can be detected and important AAS biomarkers such as totally reduced metabolites cannot be detected by this technique. On the other hand,

Manejo Simplificado

Consiga límites de detección inferiores en matrices complejas con una menor preparación de muestra. El **GC-MS/MS** de triple cuadrupolo **Thermo Scientific TSQ 8000** proporciona unas prestaciones analíticas de máximo nivel junto con la productividad sin límites que usted necesita. Diseñado para el análisis de rutina, integra tecnología de triple cuadrupolo de alta eficacia con una completa solución de software para una simplicidad sin precedentes en MS/MS, desde el inicio del análisis hasta el informe final de resultados.

Resultados Brillantes

- [Vea la mejor elección en GC-MS en thermoscientific.com/tsq8000](http://thermoscientific.com/tsq8000)

Thermo
SCIENTIFIC



Obtenga una ventaja competitiva

El espectrómetro de masas **Thermo Scientific Exactive Plus** está diseñado para darle una ventaja competitiva y así, ahorrarle tiempo y dinero reduciendo el número de falsos positivos y mayor precisión cuantitativa, a nivel de trazas, en muestras complejas.

Gracias a la tecnología **Thermo Scientific Orbitrap**, el LC-MS Exactive Plus proporciona incondicionalmente, resultados rápidos y reproducibles. Los espectros de alta resolución y masa precisa son ideales para identificar compuestos y screening de alta productividad tanto en análisis cualitativos como cuantitativos. Velocidades de barrido compatibles con UHPLC y cambio rápido de polaridad aceleran sus análisis. Esta es una combinación ganadora.

LC-MS Exactive Plus

Contacte con nosotros en: www.thermoscientific.com/exactiveplus

THERMO FISHER SCIENTIFIC: C/ Valportillo Primera nº 22
28108 Alcobendas, Madrid
Telf: 91.484.59.65



Sistemas Dionex UltiMate 3000
Soluciones exigentes para aplicaciones analíticas en LC



Columnas de HPLC
Máximo rendimiento para sus análisis



Servicios Financieros
Soluciones de financiación a su medida para hacer frente a cualquier presupuesto

Unity Lab Services

Una sencilla solución para todas las necesidades de servicio de su laboratorio

Thermo
SCIENTIFIC

EXACTIVE PLUS

besides the drawback of the compulsory derivatization step, GC-EI-MS methodologies have the limitation of the high fragmentation of the compounds in the source which can hamper the selection of an adequate precursor ion in MS/MS strategies.

In this work, a new atmospheric pressure interface with softer ionization, developed for using in gas chromatography (APGC)^[3], is investigated for detection of target AAS with GC-APGC-QqQ and GC-APGC-QTOFMS. Firstly, derivatized [4] and underivatized AAS were tested, in order to evaluate the need to apply this time-consuming sample preparation step and to check the extra structural information which can be extracted from this step. Next, the fragmentation behaviour of representative AAS was investigated by QqQ and QTOFMS, in order to be extended to other steroidal structure compounds.

This interface promotes ionization with very little fragmentation for underivatized analytes, with the result of $[M+H]^+$ or M^+ ions (depending on the presence or not of water in the interface) as the base peak of the spectra, similar to those obtained by LC-MS.

The reduced fragmentation observed by using this new source can have a significant impact on target analysis at trace levels. In the case of trimethylsilyl (TMS) derivatives, a slightly higher fragmentation was observed but also related with OTMS losses.

In both approaches, with and without derivatization, the reduced fragmentation in the full scan spectrum given by the APGC source facilitates the selection of abundant and/or more specific precursor ions in tandem MS experiments, allowing for the development of more efficient tandem MS methods, which would increase the selectivity and the sensitivity of the method.

^[1] World Anti-Doping Agency (WADA) <http://list.wada-ama.org/> (last accessed 8/6/12).

^[2] WADA accredited laboratories statistics. http://www.wada-ama.org/Documents/Resources/Statistics/Laboratory_Statistics/WADA_2010_Laboratory_Statistics_Report.pdf.

^[3] T. Portolés, J. V. Sancho, F. Hernández, A. Newton, P. Hancock, J. Mass Spectr. 45 (2010) 926.

^[4] J. Segura, R. Ventura, C. Jurado, J. Chromatogr. B. 713 (1998) 61.

12ª ASAMBLEA GENERAL DE LA SECyTA (41ª REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

La 12ª Asamblea General de la SECyTA, que contó con la asistencia de 114 socios, se celebró el día 15 de noviembre de 2012, a las 17:30 h, en el Auditorium Eutyches del Palacio de Congresos de Tarragona (Arquitecte Rovira, 2) con el siguiente orden del día:

- 1) Lectura y aprobación del Acta de la Reunión anterior.
- 2) Informe de la Presidenta.
- 3) Informe de la Secretaria.
- 4) Informe del Tesorero.
- 5) Ruegos y preguntas.

Desarrollo de la sesión y acuerdos adoptados

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

La presidenta indica a los asistentes que el acta de la 11ª Asamblea General de la SECyTA está colgada

en la página web de la SECyTA desde el mes de Febrero del presente año, para poder ser consultada por cualquier socio. Por ello, pregunta que si alguno de los asistentes quieren hacer alguna modificación al acta o si alguien tiene especial interés en que sea leída en ese momento. Después de la intervención de la Dra. Mercedes de Frutos en la que preguntaba si había algún punto en ese acta que mereciese especial atención, a lo que la Presidenta contesta que no, se aprueba el acta sin modificaciones.

2. Informe de la Presidenta.

En primer lugar, la Presidenta da la bienvenida a todos los asistentes y expresa su más sincero agradecimiento a Rosa María Marcé y a los miembros de los Comités Científico y Organizador de la XII Reunión Científica de la SECyTA por el excelente trabajo realizado.

2.1. 13^{as} JAIs y acto de homenaje a socios destacados de la SECyTA.

La Presidenta recuerda que el pasado 15 de noviembre de 2011, en el marco de las 13^{as} Jornadas de Análisis Instrumental, se concedieron varias medallas conmemorativas a destacados miembros de la Sociedad en reconocimiento a su contribución al desarrollo de las técnicas de separación en España. Así, se les otorgó dicha medalla a Joan Albaigès, Luis Esteban, Emilio Gelpí, Manuela Juárez e Isabel Martínez Castro.

Respecto a las 13^{as} Jornadas de Análisis Instrumental, la Presidenta comenta que ya se ha cerrado el capítulo económico con Expoquimia y recuerda que en esta última edición la SECyTA fue una Sociedad colaboradora, ya que la organizadora fue la SEQA.

Asimismo, anuncia que en la próxima edición de la Expoquimia, en la que se celebrarán las 14^{as} JAIs en el año 2014, la Sociedad organizadora será la SECyTA, y el resto de las Sociedades serán las colaboradoras. La SECyTA tendrá que negociar las condiciones con Pilar Navarro (máxima responsable de la Expoquimia), se intentará que la sala donde se expongan los pósters esté en el entorno de las salas de conferencias, que no haya cambio en las salas previamente asignadas a las JAIs para hacer algún acto de la Expoquimia ajeno a nuestro congreso (como ha ocurrido en anteriores ocasiones), que la cena esté incluida en la inscripción y otra serie de cosas susceptibles de mejora.

2.2. Página web de la SECyTA.

La presidenta informa de que, desde la última Asamblea General de la Sociedad, no se han producido cambios en la página web.

2.3. Cambio de entidad bancaria con el que opera la SECyTA.

Se informa a los socios de que se va a proceder al cambio de entidad bancaria con el que opera la Sociedad. El único motivo es disminuir los costes de la emisión de los recibos para cobrar la cuota de los socios y, sobre todo, el coste de los recibos devueltos. Gracias al trabajo realizado por el tesorero, Jordi Díaz (que durante su informe dará los detalles de este cambio), el cambio de banco con el que vamos a operar va a suponer un ahorro considerable, lo que realmente es una buena noticia para la Sociedad.

2.4. Boletín SECyTA.

Siempre se ha considerado que el Boletín se autofinancia con los anuncios de las empresas colaboradoras. Sin embargo, debido a la situación económica actual, muchas de estas empresas están ahora mismo reduciendo gastos, por lo que la reducción del coste de impresión y distribución del Boletín podría llegar en el momento más adecuado. La Presidenta opina que es una buena noticia, porque el recibir el Boletín dos veces al año es muy importante para la mantener viva la actividad científica de la Sociedad y la interrelación de las empresas con los socios de la SECyTA. La Presidenta excusa la ausencia de los editores del Boletín en la asamblea.

2.5. XII Reunión Científica de la SECyTA (41^a GCTA) en Tarragona.

Sobre el actual congreso destacar el elevado número de asistentes (en total 212 congresistas) y la participación de conferenciantes de primer nivel, tanto en las conferencias plenarias como las invitadas. En las conferencias plenarias impartidas por investigadores de gran prestigio internacional como el Dr. Alistair Lewis, Oleg Mayboroda, y David Mc Calley, se han presentado temas tan interesantes como la cromatografía multidimensional, la metabolómica de biofluidos y la interacción hidrofílica en cromatografía.

Los cuatro conferenciantes invitados han sido el Dr. Joan Grimalt, el Dr. Agustín Costa, el Dr. Juan Vicente Sancho y el Dr. Vicente Ferreira, y sus conferencias han versado sobre el papel de la química analítica para describir el cambio climático, la interpretación y descripción de los sabores y aromas, las posibilidades de ME-ED como instrumentación analítica transportable, y la presencia de metabolitos y productos de transformación de drogas de abuso en muestras ambientales con un gran impacto mediático.

También destacar la elevada calidad de las comunicaciones presentadas. En total se han recibido 179 comunicaciones, de las cuales 38 fueron seleccionadas como comunicaciones orales y 141 en forma de cartel.

Asimismo, destacar la concesión de 55 becas de inscripción y 54 ayudas de viaje para facilitar la asistencia al congreso a jóvenes investigadores. En esta línea, también cabe resaltar la gran cantidad de jóvenes investigadores que han participado en el congreso,



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 contribuye a la fabricación de múltiples productos de nuestro día a día y a la preservación de la vida, dentro de una gestión de desarrollo sostenible, gracias a soluciones innovadoras basadas en las últimas tecnologías.



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

casi un 40% del total de asistentes, lo cual es importante por ser ellos los que van a dar continuidad no sólo a la Sociedad sino a las investigaciones en el campo de las técnicas de separación.

Por último, se informa a los asistentes sobre la posibilidad de enviar un artículo a publicar en la revista *Journal of Chromatography A* con la reseña de este congreso (Spanish Society 2012). Se ha acordado con Elsevier como fecha límite para enviar los artículos el 15 de enero de 2013. Las instrucciones para enviar estos artículos se pueden encontrar en la web de la Reunión.

2.6. VIII Edición de los Premios José Antonio García Domínguez.

La VIII Edición de los Premios José Antonio García Domínguez se ha convocado cambiando ligeramente el formato de ediciones anteriores. Esta vez no se han solicitado resúmenes extendidos para las comunicaciones orales ni una copia del póster para las comunicaciones que desean optar a este premio. En esta ocasión, se solicitó en el momento de la inscripción que se señalara en la casilla correspondiente si se quería optar al premio. Esto se ha hecho con el fin de aumentar el número de comunicaciones que optaban al premio, que había sido bastante escaso en ediciones anteriores. Todo ello pensando en premiar la investigación de calidad y en que no quedara ningún premio desierto, como llegó a ocurrir en ediciones anteriores. El jurado encargado de fallar dichos premios se ha escogido preferentemente entre los miembros del Comité Científico y Organizador y el acto de entrega de los premios se realizará el viernes 16 de noviembre durante la clausura del congreso.

2.7. Organización de la XIII Reunión Científica de la SECyTA en Tenerife en 2013.

La Presidenta, pone de manifiesto a los asistentes la proximidad del evento, menos de un año, y la importancia que tiene este congreso para la SECyTA, tanto desde el punto de vista científico como de reconocimiento y proyección internacional de la Sociedad. Por ello, la Presidenta solicita la ayuda e implicación no sólo de la Junta de Gobierno sino de todos los socios para que la organización de este congreso sea un éxito.

A continuación, los organizadores de la próxima reunión realizan una presentación del congreso para informar a los socios de las cuestiones más relevantes.

- Fechas : entre 8 y 11 de octubre de 2013.
- Sede: Hotel Beatriz Atlantis & Spa, ubicado en el Puerto de Santa Cruz (Tenerife).
- Secretaria técnica: la empresa que llevará la secretaría técnica de la Reunión es Viaconte SL., una agencia de viajes con experiencia en la organización de este tipo de eventos.
- La XIII Reunión Científica de la SECyTA se organiza de forma conjunta con el congreso internacional ITP-2013, pero de forma independiente, tanto en el tiempo como en las inscripciones. Respecto al calendario, el ITP-2013 se celebrará del 6 al 9 de octubre de 2013 y la XIII Reunión de la SECyTA del 8 al 11 de octubre de 2013. El solapamiento de ambos congresos se produce el día 8, en la excursión al Teide por la tarde, y el día 9 en la sesión plenaria de la mañana. En cuanto a la cuota, cada congreso tendrá su cuota de inscripción y también habrá una cuota conjunta para poder asistir a ambos.
- El programa científico de la Reunión está por decidir y está abierto a las propuestas y sugerencias de los miembros de la SECyTA, tanto en lo que hace referencia a los conferenciantes invitados, temas monográficos específicos que se quieran tratar en el congreso o simplemente aspectos organizativos del programa.

Por último, la Presidenta anima a todos los socios a que vayan a la próxima Reunión y recuerda que, como todos los años, se darán becas de asistencia y ayudas de viaje al personal en formación.

3. Informe de la Secretaria.

3.1. Socios de la SECyTA.

La Secretaria de la SECyTA, Dra. Belén Gómara, informa de que desde la última Asamblea General, celebrada el 16 de noviembre de 2011 en Barcelona, hasta hoy, 15 de noviembre de 2012, se han recibido un total de 39 altas y 57 bajas. En el listado actual de Secretaría el número de socios a día de celebración de esta Asamblea es de 564 socios.

Aunque el número de altas se mantiene en la media de los últimos años, este descenso en el número de socios se ha debido principalmente a dos motivos. Por un lado, a finales de 2011 y a raíz del acto de entrega de medallas celebrado durante las pasadas JAIs, se registró el paso de un número relativamente elevado de

socios del estatus de socios ordinarios a jubilados. Por otra parte, la situación económica general que afecta a todos los sectores también ha afectado a la Sociedad y durante 2012 se han registrado un mayor número de bajas de socios de lo que viene siendo habitual.

3.2. Ayudas concedidas por la SECyTA.

Se han concedido 3 ayudas (de 500 € cada una) para la asistencia a congresos internacionales, distribuidos de la siguiente forma:

- 1 ayuda para la asistencia al EuPA 2012 Scientific Congress "New Horizons and Applications for Proteomics" celebrado en Glasgow, UK, del 9 al 12 de julio de 2012.
- 2 ayudas para la asistencia 29th International Symposium on Chromatography celebrado Torun, Polonia, del 9 al 13 de septiembre de 2012.

En el caso de la XII Reunión Científica de la SECyTA, la Sociedad ha concedido un total de 55 becas de inscripción (que han supuesto un total de 11.955 €) y 54 ayudas de viaje (7.800 € en total) a jóvenes investigadores socios de la SECyTA para la asistencia al mencionado congreso.

3.3. Colaboración de la SECyTA con otros congresos.

La SECyTA colaboró en la celebración del 38th International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques (HPLC 2012) celebrado en Anaheim, CA (EE.UU.) del 16 a 21 de junio de 2012. La colaboración consistía en la concesión de becas de inscripción y ayudas de viaje, aunque no se recibió ninguna solicitud para este congreso.

3.4. Temas Generales.

Se sigue trabajando en la ardua tarea que iniciaron el secretario y la tesorera anterior para conseguir la unificación de los listados de socios entre Secretaría, Tesorería y Boletín. Se está tratando de crear una base de datos conjunta, pero este punto está todavía en proceso.

También se está planteando la mejor forma de llevar a cabo la actualización de los datos de los socios. Se está barajando enviar por correo postal una carta a cada socio con los datos que actualmente constan en

los registros de la Sociedad, para que cada socio modifique complete y actualice sus datos personales y, principalmente, de contacto (cuenta corriente, para facilitar el cobro de las cuotas; correo electrónico, para recibir correctamente las comunicaciones de la Sociedad; y correo postal, para recibir el Boletín).

Como ya ha comentado la Presidenta, también se aprobaron las nuevas bases para la VIII Edición del Premio José Antonio García Domínguez (patrocinado por Bruker) en la reunión de la Junta de Gobierno del 20 de febrero de 2012 en Tarragona.

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:

- 14 congresos nacionales e internacionales (HTC-12, MSB-2012, 7th International Symposium on Recent Advances in POPs Analysis, ISCC-2012 and 9th GCxGC, HPLC-2012, 8th LC/MS/MS Workshop, ICS-2012, DIOXIN-2012, ISC-2012, ISSS-2012, ITP-2012, SPICA-2012, 3rd SCAR-CE).
- 2 Webinars de casas comerciales.
- 3 cursos de especialización.

3.6. Próximos congresos.

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

- XIII Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas (2013) y el 20th International Symposium on Electro- and Liquid Phase Separation-Techniques (ITP-2013). Puerto de la Cruz (Tenerife). 6 – 9 de octubre 2013. Chairmen: Drs. Miguel Ángel Rodríguez-Delgado y Alejandro Cifuentes.
- XVIII Reunión de la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA) y VI Reunión de la Sociedad Española de Espectrometría de Masas (SEEM). Úbeda (Jaén). 16 – 18 de junio 2013.
- IV Reunión Nacional de Dioxinas, Furanos y Compuestos Orgánicos Persistentes Relacionados. Alicante. 26 – 28 de junio de 2013. Chairman: Dr. Juan Antonio Conesa Ferrer.

- 34th International Symposium on halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs) - DIOXIN 2014. Madrid, Agosto-Septiembre 2014. Chairwoman: Dra. Begoña Jiménez.

Al finalizar el informe de Secretaría, el Dr. Guillermo Ramis Ramos comenta que el congreso HPLC 2013 no ha quedado recogido en la presentación de la Secretaria dentro de los próximos congresos a celebrar siendo uno de los congresos de cromatografía más importantes. La secretaria contesta que en la presentación se han recogido únicamente los congresos en los que están implicados de alguna manera la Sociedad o alguno de sus socios.

En la misma línea, el Dr. Guillermo Ramis Ramos llama la atención sobre el hecho de que dicho congreso (HPLC 2013) coincide en fechas con la Reunión Anual de la SEQA que se celebrará en Úbeda y pone de manifiesto que se debería tener cuidado a la hora de elegir las fechas de las Reuniones de nuestras Sociedades nacionales para no hacerlas coincidir con grandes congresos internacionales como el HPLC. La secretaria agradece el comentario y lo tendrá en cuenta para futuras reuniones de la SECyTA y comenta que supone que la SEQA habrá tenido sus motivos para elegir dichas fechas (muchas veces económicos y de sede) pero que no posee esta información al no ser socia de la SEQA.

3.7. Informe del Boletín.

En nombre de los editores se recuerda a todos los socios que están invitados a participar en el Boletín y que los posibles modos de participación son artículos (que están remunerados con 300€), curiosidades analíticas, artículos de interés, reseñas de libros y notas y novedades técnicas (este apartado dedicado a empresas).

4. Informe del Tesorero.

4.1. Estado actual de las cuentas de la Sociedad.

El Tesorero de la SECyTA, Dr. Jordi Díaz Ferrero, presenta el estado de cuentas y el balance de ingresos y gastos correspondientes al ejercicio 2012 (enero-noviembre 2012) cuyo balance es positivo. Asimismo, informa que queda pendiente proceder al cobro de las cuotas de socios correspondiente al año 2012, el cual se llevará a cabo desde la nueva entidad bancaria.

Después de estudiar las condiciones económicas de la entidad actual (La Caixa) y de otras dos entidades nuevas (BBVA y Banco Santander) se ha decidido cambiar al BBVA ya que los gastos de comisiones y aquellos derivados por la gestión del cobro y posible devolución de los recibos de las cuotas de los socios son con diferencia las más favorables económicamente para la Sociedad. La media de devoluciones de cuotas de los últimos años ha sido superior al 10% de los recibos emitidos lo cual suponía un gasto considerable para la Sociedad, gasto que con la nueva entidad reduciremos. También queda pendiente contabilizar los gastos derivados de las becas concedidas en la XII Reunión Científica.

A continuación, el Tesorero presenta los gastos para la Sociedad derivados de la celebración de las 13^{as} JAIs, teniendo en cuenta las becas de inscripción y ayudas de viaje concedidas y otros gastos asociados a la celebración de dicho congreso.

Por último, el Tesorero recuerda que el cambio de entidad bancaria redundará en una disminución de los gastos de gestión, que se está llevando a cabo la unificación de los listados de socios entre Secretaría, Tesorería y Boletín para mejorar en la atención al socio y en la disminución del número de gestiones. A este respecto, informa de que las cuotas de socios del año 2012 se intentarán cobrar a lo largo del mes de diciembre de 2012 y de no ser posible (porque se demoren las gestiones del cambio de entidad) en enero de 2013 y que las cuotas de 2013 se pasarán a mediados de año (para intentar evitar pasar dos cuotas muy seguidas) y que para años sucesivos se emitirán los recibos a lo largo del primer trimestre del año para intentar regularizar el cobro de cuotas a principio de año y no a año vencido como se venía haciendo hasta ahora.

5. Ruegos y preguntas

En este punto del orden del día, la Dra. Mercedes de Frutos pregunta si existe algún sistema automático para dar de baja las ofertas y noticias que se publican en la web de la SECyTA. Principalmente hace referencia a las ofertas de becas y contratos que publican los investigadores y pregunta si se dan de baja de forma automática pasado un determinado tiempo o debe ser el investigador que pidió publicar esa oferta el que debe pedir que se elimine de la web cuando considere oportuno. La Presidenta da la palabra a Mario

Fernández (uno de los responsables de la publicación de noticias, eventos, etc. en la web) quien informa de que no existe ningún mecanismo automatizado para ello y aprovecha para solicitar a las personas que le pidan dar de alta alguna información en la web que sean ellas mismas las que se encarguen de decirle (llegado el momento) que retire dicha noticia, oferta, o similar de la web.

La Dra. María Teresa Galcerán comenta que durante las sesiones de póster observó que el número de estudiantes era algo bajo mientras que es notable el incremento del número de estudiantes en las comunicaciones orales. Sugiere que quizá esto se deba a que los estudiantes piensan que las comunicaciones orales tienen un mayor valor curricular, asunción que no es totalmente cierta, y a que las sesiones de póster han coincidido con los seminarios de las casa comerciales y puede que los estudiantes estuviesen interesados en asistir a dichos seminarios, dejando de lado la defensa de sus pósters. La Presidenta contesta que está totalmente de acuerdo en esa observación y que quizá se ha dedicado poco tiempo a los póster a lo largo de la Reunión. La Presidenta opina que debemos tender a darle más peso a los pósters en nuestras siguientes reuniones científicas y tratar por todos los medios de evitar que coincidan con ningún otro evento. Asimismo, comenta que está expectante por poder ver qué tal resultado dan las sesiones de discusión de pósters previstas para el día siguiente.

A raíz de lo mencionado por el Tesorero respecto a adelantar el pago de las cuotas al primer trimestre a partir del año 2014 y siguientes, el Dr. Fco. Javier Rupérez pregunta que cuando se suelen dar de alta los nuevos socios. El Tesorero responde que suelen hacer-

lo a finales de año, justo antes de la celebración de la Reunión Anual y el Dr. Rupérez comenta que, en ese caso, se les estaría pasando dos cuotas (la del año que se dan de alta a finales de ese año y la del año siguiente) en un periodo corto de tiempo (unos pocos meses). El Tesorero contesta que en cualquier tipo de cuota anual lo normal es cobrarla a principio de año y que esa cercanía en el cobro de dos cuotas sólo se produciría el primer año. Asimismo, la Secretaria interviene para aclarar que los nuevos socios se pueden dar de alta en cualquier momento del año y que si lo hacen justo antes de la celebración de la Reunión Científica es porque la mayoría de ellos a la vez de darse de alta solicitan la beca de inscripción y la ayuda de viaje. La Secretaria propone que quizá deban ser los investigadores los que inviten a los nuevos estudiantes que entren en sus grupos a hacerse socios de la SECyTA nada más empezar su periodo formativo y no esperar a la celebración de una Reunión de la Sociedad para decirles que se hagan socios.

El Dr. Jose Carlos Díez-Masa comenta que hasta la fecha han existido muchos problemas con las domiciliaciones de las cuotas de socios de aquellos socios cuyas cuentas de cobro estaban en el Banco Santander. El Tesorero contesta que es totalmente cierto y que ese ha sido también uno de los motivos que le han llevado a proponer un cambio de entidad bancaria.

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 12ª Asamblea General de la SECyTA a las 19:05 h. del citado día.

Belén Gómara Moreno
Secretaria de la SECyTA

NUEVOS SOCIOS DE LA SECyTA

1656

D'Agostino, María Francesca
Departamento de Análisis Instrumental y Química
Ambiental
Instituto de Química Orgánica General (CSIC)
C/ Juan de la Cierva, 3
28006-MADRID

1657

Rosales Castillo, Luis
CECEM Departamento de Analítica, Facultad de
Química
Universidad de Barcelona
C/ Martí i Franques, 1
08028-BARCELONA

1658

Socas Rodríguez, Bárbara
Molino del Viento, 46
38428-SAN JUAN DE LA RAMBLA (SANTA CRUZ
DE TENERIFE)

1659

Ferrarini, Alessia
Universidad San Pablo CEU
Carretera Boadilla del Monte km 5,300 (Urbanización
Montepríncipe)
28668-BOADILLA DEL MONTE (MADRID)

1660

Navarrete Rodríguez, Alicia
Universidad San Pablo CEU
Carretera Boadilla del Monte km 5,300 (Urbanización
Montepríncipe)
28668-BOADILLA DEL MONTE (MADRID)

1661

Vieira Alberice, Juliana
García Noblejas, 4-25
28660-BOADILLA DEL MONTE (MADRID)

1662

Simas Porto, Brenda Lee
Universidad San Pablo CEU
Carretera Boadilla del Monte km 5,300 (Urbanización
Montepríncipe)
28668-BOADILLA DEL MONTE (MADRID)

1663

de Oliveira Mendes, Thiago
Universidad San Pablo CEU
Carretera Boadilla del Monte km 5,300 (Urbanización
Montepríncipe)
28668-BOADILLA DEL MONTE (MADRID)

1664

González Benito, Licel
Plaza 8 de Marzo, 7^º 1^ª
08241-MANRESA (BARCELONA)

1665

Beltrán Arandes, Joaquín
Universitat Jaume I
Avda. Vicent Sos Baynat s/n
12071-CASTELLÓN

1666

Junza Martínez, Alexandra
Departamento de Química Analítica, Facultad de
Química, Universidad de Barcelona
Avenida Diagonal, 645.
08028-BARCELONA

1668

Salvadó Martín, Victoria
Departamento de Química. Universitat de Girona
Campus Montilivi s/n.
17071-GIRONA

1669

Carrero Carralero, Cipriano
C/Lillo, 6
28380-COLMENAR DE OREJA (MADRID)

1670

Nácher Mestre, Jaime
Instituto Universitario de Plaguicidas y Aguas.
Universidad Jaume I
Avda. Vicent Sos Baynat s/n
12071-CASTELLÓN DE LA PLANA (CASTELLÓN)

1671

Montero García, Lidia
Nicolás Cabrera, 9
28049-MADRID

1672

Novell Sollerdelcoll, Arnau
Jaume Roig, 30-36, 1-1
08028-BARCELONA

1673

Martínez Peral, Dolors
EMATSA, Empresa Mixta Aigües Tarragona
Muntanyeta Sant Pere i Sant Pau, s/n
43007-TARRAGONA

NOTICIAS DE LA SECyTA

1674

Álvarez Casas, Marta
Nuestra Señora de la Mercé de Conxo, 7
15706-SANTIAGO DE COMPOSTELA (LA
CORUÑA)

1675

Garde Cedrán, Teresa
Plaza de Alsasua, 4
31390-OLITE (NAVARRA)

1676

Ortiz Romero, Leticia
Avda. Burgos, 157
26007-LOGROÑO (LA RIOJA)

1677

Escrig Doménech, Aarón
Universidad de Valencia, Facultad de Química,
Departamento de Química Analítica, Laboratorio 10
Dr. Moliner, 50 Edificio E 2º Piso
46100-BURJASSOT (VALENCIA)

1678

Vergara Barberán, María
Universidad de Valencia, Facultad de Química,
Departamento de Química Analítica, Laboratorio 10
Dr. Moliner, 50 Edificio E 2º Piso
46100-BURJASSOT (VALENCIA)

1679

Herrero Martínez, José Manuel
Universidad de Valencia, Facultad de Química,
Departamento de Química Analítica
Dr. Moliner, 50
46100-BURJASSOT (VALENCIA)

1680

Valdivielso Zubira, Izaskun
Pío XII, 17
01004-VITORIA-GASTEIZ (ÁLAVA)

1681

Ripoll Seguer, Laura
Universidad de Valencia, Facultad de Química,
Departamento de Química Analítica
Dr. Moliner, 50
46100-BURJASSOT (VALENCIA)

1682

Simó Alfonso, Ernesto Francisco
Universidad de Valencia, Facultad de Química,
Departamento de Química Analítica
Dr. Moliner, 50
46100-BURJASSOT (VALENCIA)

1683

Bataller Fayos, Cecilia
Ausias March, 37
46840-LA POBLA DEL DUC (VALENCIA)

1684

Aceña Sánchez, Jaume
Pla de la Torreta, 2
08392-SANT ANDREU DE LLAVANERES (BARCE-
LONA)

1685

Pérez Fernández, Francisca
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua
(IDAEA)
C/ Jordi Girona, 18
08034-BARCELONA

1686

Barón González, Enrique
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua
(IDAEA)
C/ Jordi Girona, 18
08034-BARCELONA

1688

Molins Delgado, Daniel
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua
(IDAEA)
C/ Jordi Girona, 18
08034-BARCELONA

1689

Díaz Cruz, Silvia
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua
(IDAEA)
C/ Jordi Girona, 18
08034-BARCELONA

1690

Monfort Mercader, Nuria
C/Llull, 263 pral 3ª
08005-BARCELONA



INFORMACIONES

CONGRESOS CELEBRADOS

EuPa 2012 Scientific Congress

Glasgow, United Kingdom, 9-12th July, 2012

The scientific meeting “EuPA 2012 Scientific Congress” titled “New Horizons for Proteomics and Applications” took place in the city of Glasgow (United Kingdom) between 9th and 12th July 2012. The conference was organized by the European Society of Proteomics (EuPA) and the British Society for Proteomics Research (BSPR) and took place in the Glasgow Royal Concert Hall, located in the city center. The scientific program aimed to reflect the innovations and the latest developments in proteomics technology and the most innovative applications in areas such as systems biology, medicine and food.

The meeting started the first day with workshops titled “Protein Quantitation: Label-free Labelling and Chemical Approaches” and “SILAC-based proteomics quantitative.” In the remaining three days oral and written communications were exposed, divided into the following sections: “Chemical Proteomics”, “Dealing with the Data Mountain”, “Clinical Proteomics”, “The Dynamic Proteome”, “Food Security and Plant Proteomics”, “Beyond a Proteomics Mass Spectrometer” and “Emerging Themes”. Among the speakers there were recognized international relevant scientists, such as A. Heck, J. Rappsilber, M. M. Larsen Selbach, and young outstanding scientists such as A. Panchaud or T. Geiger. It was also organized a session for the presentation of scientific papers by young researchers, EuPA members. Between morning and afternoon sessions, and as usual, workshops and exhibitions of the commercial sponsors of the conference were performed. Additionally, round tables were also organized involving leading European scientists in the field of proteomics, which allowed a direct dialogue with young scientists and a unique opportunity for exposure and discussion of problems in the laboratory. It was also celebrated a scientific contest titled “Proteomics Photography & Graphical Abstracts” involving the top 20 scientific images related to proteomics.

The 2012 EuPA Scientific Congress was closed on Thursday 12th July with a ceremony at which prizes were awarded to the best posters by the Royal Society of Chemistry and the Journal of Proteomics. The best

poster award was given to M. Shabaz by the poster entitled “Towards unrevealing key components in molecular biology with adult stem cell mass spectrometry based proteomics”. The scientific work of Professor R. Aebersol was also recognized, and he was the responsible for closing the ceremony with the conference “Quantitative Proteomics and System Biology”. Finally, it was presented the program for the next meeting “EuPA 2013 Scientific Congress” that will be held in St. Malo in October 2013.

Clara Esteve Gil

*Dpto. Química Analítica e Ingeniería Química
Universidad de Alcalá*

29th International Symposium on Chromatography

Between 9th and 13th September 2012 in the city of Toruń (Poland) was held the “29th International Symposium on Chromatography”. This conference was held for the first time in 1956 in London, and since then it is celebrated every two years in a selected European city. This year the country was Poland, a country of particular importance in the area of chromatography, since the first chromatographic separation was discovered in Warsaw, the capital of Poland. During these four days under the slogan “Chromatography and Science: Past, Present and Future”, numerous plenary sessions, poster or oral presentations and several workshops were presented.

All presented works were included into the following categories: fundamentals, gas chromatography and supercritical fluid, thin layer chromatography and HPLC, electrophoretic techniques, miniaturization, hybridization and coupling, sample preparation, validation, analysis of food, analysis in the pharmaceutical and biomedical, health, environmental analysis, new stationary phases, “Omics”, method development and bioactive compounds. In total, more than 60 oral communications submitted by researchers belonging to renowned research center or universities all around the world and more than 500 poster presentations have been presented.

In the first day, several courses and workshops as well as three plenary sessions were presented. It is



important to highlight the lecture given by Professor Ada Yonath of the Weizmann Institute of Science in Rehovot (Israel), Nobel Prize in Chemistry, entitled "Nascent proteins travel through the ribosomal exit tunnel." The second day of the congress was related to electrophoretic techniques, biomarker analysis, stationary phases and columns, gas chromatography, sample preparation and separation techniques in the industry. The day ended with a classical music concert in the Church of St. Mary in the historic center of

Toruń. The third and fourth day conference was divided into several categories, inter alia: hybridization and coupling, miniaturization, "Omics", method development, food analysis, fundamentals and bioactive compounds. Finally, at the closing ceremony the awards for the best poster and oral presentations were granted.

Patrycja Puchalska y Virginia Pérez
Universidad de Alcalá

CALENDARIO DE ACTIVIDADES

1. SCM-6: 6th International Symposium on the Separation and Characterization of Natural and Synthetic Macromolecules

6 - 18 Febrero de 2013. Dresde (Alemania)

Contacto:

Tel: +49 351 4658 282 • Fax: +49 351 4658 214
scm-6@ipfdd.de • www.scm-6.de

2. MSB 2013: 29th International Symposium on Microscale Bioseparations.

10 - 14 Marzo de 2013. Charlottesville, VA (EE.UU.)

Contacto:

James Landers y Jeff Chapman (Chairmen)
Patricia White (Symposium Manager)
www.msb2013.net

3. HPLC 2013: Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques.

16 - 20 Junio de 2013. Amsterdam (Holanda).

Contacto:

Peter Schoenmakers y Wim Kok (Chairmen)
www.hplc2013.org

4. ICCE 2013: 14th EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment. (Including Workshop Alternative Flame Retardants: Analysis, Occurrence and Exposure)

25 - 28 Junio de 2013. Barcelona (España)

Contacto:

Eric Jover y Santiago Luis (Co-chairmen)
www.icce2013.org/wellcome.html

5. PREP 2013: International Symposium on Preparative and Process Chromatography

14 - 17 Julio de 2013. Boston, MA (EE.UU.)

Contacto:

PREP Symposium/Exhibit Manager
Ms. Janet Cunningham
Barr Enterprises
www.LinkedIn.com/in/BarrEnterprises 301-668-6001
janetbarr@aol.com
www.prepsymposium.org

6. XVII EUROANALYSIS: European Conference on Analytical chemistry

25 - 29 Agosto de 2013. Varsovia (Polonia)

Contacto:

Maciej Jarosz & Ewa Bulska (Chairpersons)
Wima Convention (Conference Secretariat)
secretariat@euroanalysis2013.pl
www.euroanalysis2013.pl

7. DIOXIN 2013: 33rd International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants

25 - 30 Agosto de 2013. Daegu (Corea del Sur)

Contacto:

Prof. Jae-Ho Yang (Chairman)
yangjh@cu.ac.kr
www.dioxin2013.org

8. ITP 2013: 20th International Symposium on Electro- and Liquid Phase-separation Techniques.
6 - 9 Octubre de 2013. Tenerife (España).

Contacto:
Prof. Alejandro Cifuentes y Javier Hernández-Borges (Chairmen)
www.itp2013.ull.es

9. XIII Reunión de la SECyTA.
9 - 11 Octubre de 2013. Tenerife (España)

Contacto:
Prof. Alejandro Cifuentes y Miguel Ángel Rodríguez Delgado (Chairmen)
www.secyta2013.ull.es

10. Recent Advance in Food Analysis
5-8 Noviembre de 2013. Praga (República Checa)

Contacto:
Prof. Dr. Jana Hajslova (chair) y Prof. Dr. Michel Nielen (co-chair)
www.rafa2013.eu/RAFA_2013_flyer_1.pdf

11. ExTech 2013: 15th International Symposium on Advances in Extraction.
4-7 Agosto de 2013. João Pessoa - Paraíba (Brasil)

Contacto:
Prof. Dr. Fabio Augusto
extech2013@gmail.com
www.extech2013.com.br

12. 37th International Symposium on Capillary Chromatography And 10th GCxGC Symposium
12-16 Mayo de 2013. Palm Springs, CA (USA)

Contacto:
<https://m360.casss.org/frontend/event.aspx?EventId=46811>

13. ICASS 2013: 59th International Conference on Analytical Sciences and Spectroscopy
26-28 Junio de 2013. Mont-Tremblant, Québec

Contacto: Diane Beauchemin (Conference Chair)
Diane.beauchemin@chem.queensu.ca
www.csass.org/ICASS.html



Queridos lectores,

Os seguimos animando a que participéis en la sección de “Curiosidades Analíticas”, enviándonos algunos aspectos o problemas que se os hayan presentado en vuestro trabajo del día a día.

Os recordamos que el objetivo principal es que todos veamos los problemas que pueden surgir con la Cromatografía y que no nos sorprendamos de si nos ocurre algo similar.

El Comité Editorial



ARTÍCULOS DE INTERÉS

La metabolómica, una de las más recientes ciencias ómicas, aporta herramientas para mejorar el diagnóstico y la comprensión de los mecanismos patológicos de enfermedades multifactoriales y complejas. Con el término “*Metabolomics*” se define el análisis del perfil completo (= metaboloma) de todos los metabolitos de bajo peso molecular, presentes en un compartimento biológico, en un estado fisiológico particular y bajo un conjunto dado de condiciones. Estos metabolitos representan los productos finales de los procesos celulares y pueden considerarse como la expresión final de un sistema frente a modificaciones genéticas y medioambientales. Así por ejemplo, el análisis comparado del metaboloma permite buscar marcadores de diagnóstico o de pronóstico de una patología, de su evolución ante un tratamiento o una dieta, del mecanismo de acción o potencial toxicidad de un fármaco, entre otros.

Uno de los principales desafíos analíticos de la metabolómica sigue siendo la adquisición del metaboloma global, que supone el empleo de estrategias muy diferentes a las clásicas, enfocadas generalmente a un análisis más selectivo. En este sentido, diversos autores han demostrado cómo, a través del uso de diferentes herramientas analíticas y métodos novedosos de tratamiento de muestra, es posible detectar una gran cantidad de metabolitos presentes en una única muestra biológica compleja. Así, las técnicas de separación como HPLC, GC y CE acopladas a espectrometría de masas (MS) han probado ser de gran utilidad para incrementar la información proporcionada por la resonancia magnética nuclear (RMN), técnica clásica para el estudio metabolómico. La información generada es extraída y comparada mediante técnicas quimiométricas multivariantes, a fin de detectar cambios metabólicos específicos para los distintos fenotipos objeto de estudio o identificar posible biomarcadores de la patología.

A continuación se presentan tres trabajos donde se proponen diferentes técnicas analíticas de separación acopladas a MS para llevar a cabo estudios metabolómicos sobre diferentes enfermedades complejas.

“In-vial dual extraction for direct LC-MS analysis of plasma for comprehensive and highly reproducible metabolic fingerprinting”

Luke Whiley, Joanna Godzien, Francisco J Ruperez, Cristina Legido-Quigley, Coral Barbas.
Analytical Chemistry, 2012, 84(14), 5992-9.

El análisis del metaboloma requiere alcanzar un compromiso entre trabajar con una muestra tan intacta como sea posible, por una parte, y la limitación en la capacidad de resolución de la técnica cromatográfica utilizada y el conocido efecto de supresión iónica en MS por otra. El desarrollo de nuevos métodos analíticos, diferentes de los

enfoques clásicos, es necesario para asegurar que el vasto número de metabolitos presentes en un fluido biológico sea detectado. Este aspecto cobra especial relevancia cuando no es posible utilizar diferentes plataformas analíticas, debido a la cantidad de muestra disponible.

Con este objetivo los autores del presente trabajo desarrollaron una innovadora metodología analítica, que permite la detección de potencialmente todos los metabolitos (alrededor de 4500 metabolitos) empleando tan sólo 20 µL de plasma, de manera reproducible y eficaz. El método consiste en una precipitación de proteínas con metanol, seguida de una extracción con metil-terbutiléter (MTBE), que da lugar al reparto de la muestra en dos fases (una apolar y otra polar), todo ello realizado en el mismo vial (*in vial dual extraction*, IVDE). Además, regulando la altura de la aguja del inyector, cada una de las fases es inyectada independientemente, y analizada con un método cromatográfico (LC) desarrollado *ad hoc*. La detección se realizó por espectrometría de masas, empleando un analizador de cuadrupolo-tiempo de vuelo (QTOF), tanto en modo positivo como negativo. Esta metodología reduce las etapas de manipulación de la muestra y las variaciones analíticas asociadas disminuyen sensiblemente. Además, el uso de MTBE como extractante de la fase apolar, mejoró la separación de los fosfolípidos, en comparación con el clásico método de Folch y el conjunto de las dos fases aumentó la información aportada únicamente por la lipidómica.

La metodología desarrollada se aplicó a muestras de plasma de voluntarios y se comparó con otras metodologías publicadas, resultando un incremento del 378 % y 269 % en los compuestos identificados.

Los autores de este artículo compararon también las capacidades del nuevo método para la investigación de biomarcadores, aplicando el método IVDE a modelos animales de diabetes. Para ello se analizaron muestras de plasma de ratas diabéticas y control. En concreto, la metodología IVDE dio lugar a un incremento en los metabolitos identificados como responsables con significación estadística de la separación entre controles y animales enfermos.

“Effect of a nutraceutical treatment on diabetic rats with targeted and CE-MS non-targeted approaches”

Joanna Godzien, Diana García-Martínez, Paz Martínez-Alcázar, Francisco J. Rupérez, Coral Barbas.
Metabolomics, 2011, DOI 10.1007/s11306-011-0351-y.

Este artículo describe el desarrollo de un nuevo método para investigar el efecto de un tratamiento nutracéutico con propiedades antioxidantes en el perfil meta-

bólico (*metabolic fingerprinting*) de orina de ratas diabéticas, consideradas como modelo de estrés oxidativo. Los animales se dividieron en cuatro grupos experimentales: controles, diabéticos, enfermos a los que se administraba un extracto de romero (*Rosmarinus officinalis*) con ácido fólico y enfermos a los que se aplicaba sólo una dosis de placebo. Los cambios metabólicos se investigaron comparando los perfiles obtenidos por electroforesis capilar acoplada a espectrometría de masas con analizador de tiempo de vuelo (CE-TOF-MS), utilizando diferentes métodos de estadística clásica y multivariante, como t-test, S-plot, Jackknife y SUS-plot. De este modo se detectaron 229 metabolitos presentes en orina responsables de la diferenciación entre los grupos de animales. Una vez identificados tentativamente haciendo uso de distintas bases de datos los compuestos estadísticamente significativos, la identificación de dichos metabolitos se confirmó mediante análisis de patrones, estudio de la distribución de su perfil isotópico y predicción del tiempo de migración.

Además, los autores evaluaron las variaciones debidas al efecto del tratamiento en parámetros plasmáticos comúnmente alterados en la diabetes. Los resultados obtenidos denotan una disminución en la diuresis, los niveles plasmáticos de triglicéridos y una reducción en el patrón del ácido 2-amino-butírico, leucina/isoleucina y dimetilglicina. Asimismo, otros compuestos relacionados con el metabolismo de diferentes aminoácidos se identificaron también como marcadores útiles del efecto del tratamiento.

Con los resultados obtenidos en este trabajo sobre analitos iónicos y polares detectados por CE-TOF-MS, los autores completan así el estudio de huellas metabólicas llevado a cabo por LC-QTOF-MS sobre estas muestras previamente publicado (Godzien et al., 2011). Finalmente, los métodos desarrollados muestran cómo el tratamiento con extractos nutraceuticos enriquecidos puede mejorar algunas de las complicaciones debidas a la diabetes.

“Improving metabolite knowledge in stable atherosclerosis patients by association and correlation of GC-MS and 1H NMR fingerprints”

Joanna Teul, Francisco J. Rupérez, Antonia García, Julie Vaysse, Stéphane Balayssac, Véronique Gilard, Myriam Malet-Martino, José Luis Martín-Ventura, Luis Miguel Blanco-Colio, José Tuñón, Jesús Egado, Coral Barbas. *Journal of Proteome Research*, 2009, 8(12), 5580-9.

En este artículo se propone el uso de dos técnicas analíticas diferentes para investigar las rutas metabólicas alteradas en pacientes que presentan arteriosclerosis carotídea estable. De este modo, es posible obtener una imagen clara de las muestras analizadas, no sólo con el fin de clasificar los pacientes frente a controles, sino para definir el estado metabólico alterado por la patología.

Las muestras de plasma provenientes de pacientes y sujetos controles se analizaron mediante GC-MS con analizador de trampa iónica y por ¹H-NMR, mejorando así el número de metabolitos detectado en un único fluido biológico. Una vez alineados los perfiles, los datos obtenidos se normalizaron y las matrices elaboradas se analizaron mediante análisis estadístico multivariante.

Los modelos de análisis de componentes principales (PCA), de análisis discriminante por mínimos cuadrados parciales (PLS-DA) y de PLS-DA ortogonal (OPLS-DA) probaron ser eficaces para clasificar las muestras según la patología, así como para la identificación de posibles biomarcadores. Además, los autores aplicaron el coeficiente de correlación de Pearson, utilizando un programa desarrollado en Matlab, para establecer las correlaciones más significativas entre la totalidad de variables determinadas conjuntamente por ambas técnicas. Los resultados obtenidos presentaron un alto nivel de correlación en la zona de los aminoácidos, incluso con datos procedentes de distintas técnicas, e indicaron el ácido 2,3,4-tri-hidroxibutírico como posible marcador de daño en la pared de las arterias, estando este compuesto correlacionado con muchos compuestos detectados. En concreto, 24 metabolitos resultaron alterados en el grupo de los pacientes ateroscleróticos, señalando alteraciones en el metabolismo características de la resistencia insulínica. La relación entre diabetes y enfermedad cardiovascular es conocida pero, en este artículo, se ponen de manifiesto por primera vez cambios metabólicos que se pueden explicar mediante una resistencia insulínica aumentada en pacientes con aterosclerosis que no están diagnosticados como diabéticos. La relevancia de los resultados de este estudio piloto para re-evaluar las pautas farmacológicas de esta patología es enorme.

Como conclusión, las estrategias de metabolómica como el análisis diferencial de la huella metabólica realizado con las técnicas de separación acopladas a espectrometría de masas previamente descritas, permiten el estudio a nivel molecular de los efectos de enfermedades complejas sobre un sistema biológico, aplicando métodos novedosos de tratamiento de las muestras, así como diferentes plataformas analíticas complementarias.

Alessia Ferrarini

Centro de Metabolómica y Bioanálisis (CEMBIO)
Universidad San Pablo CEU



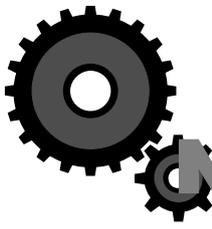
EMPRESAS colaboradoras

PROTECTORAS

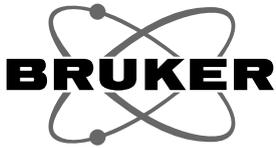
- **AGILENT TECHNOLOGIES SPAIN, S.L.**
Ctra. A-6, km 18,200
28230 LAS ROZAS (Madrid)
- **BRUKER ESPAÑOLA, S.A.**
Avda. Marie Curie, 5, Edificio Alfa - Pta. Baja
Parque Empresarial Rivas Futura
28529 RIVAS-VACIAMADRID (Madrid)
- **PERKIN ELMER ESPAÑA, S.L.**
Avda. de los Encuartes, 19
28760 TRES CANTOS (Madrid)
- **SIGMA-ALDRICH QUÍMICA, S.A.**
Ronda de Poniente, 3; 2ª Planta
28760 TRES CANTOS (Madrid)
- **TEKNOKROMA**
Camí de Can Calders, 14
08173 SANT CUGAT DEL VALLÉS
(Barcelona)
- **THERMO FISHER SCIENTIFIC**
Valportillo I, 22; 1ª Planta
Edificio Caoba
28108 ALCOBENDAS (Madrid)
- **WATERS CROMATOGRAFÍA, S.A.**
Ronda Can Fatjo, 7-A
Parc Tecnologic del Vallés
08290 CERDANYOLA DEL VALLES
(Barcelona)

ASOCIADAS

- **ALAIR LIQUIDE ESPAÑA, S.A.**
Paseo de la Castellana, 35
28046 MADRID
- **GILSON INTERNATIONAL B.V.**
Avda. de Castilla, 1 (N II Km 17)
Polígono Empresarial San Fernando
28830 SAN FERNANDO DE HENARES (Madrid)
- **GOMENSORO, S.A.**
Aguacate, 15
28044 MADRID
Tlf. 91 508 65 86
vicente.ubeda@gomensoro.net
- **INGENIERÍA ANALÍTICA, S.L.**
Aveda. Cerdanyola, 73, 3ª Izq
08172 SANT CUGAT DEL VALLÉS (Barcelona)
- **IZASA, S.A.**
Aragonenses, 13
Polígono Industrial Alcobendas
28108 ALCOBENDAS (Madrid)
- **MICRÓN ANALÍTICA, S.A.**
C/ Rafael Bergamín, 16B
28043 Madrid
- **MILLIPORE IBÉRICA, S.A.U.**
Avda. de Burgos, 144
28050 MADRID
- **SCHARLAB, S.L.**
Gato Pérez, 33
Polígono Industrial Mas D'en Cisa
08181 SENTMENAT (Barcelona)
- **SERVICIO Y MANTENIMIENTO DE TÉCNICAS ANALÍTICAS, S.A.L. (SYMTA, S.A.L.)**
San Máximo, 31
28041 MADRID
- **S.I.A. ENGINYERS, S.L.**
Monturiol, 16, baixos
08018 BARCELONA
- **SOCIEDAD ESPAÑOLA DE CARBUROS METÁLICOS**
C/ Aragón, 300
08009 BARCELONA
Tlf.: 902 13 02 02
oferta@carburos.com
- **SUGELABOR**
Sicilia, 36
28038 MADRID
- **VERTEX TECHNICS, S.L.**
Comercio, 12-14 bajos
08902 HOSPITALET DE LLOBREGAT
(Barcelona)
- **VWR INTERNATIONAL - EUROLAB, S.L.**
Calle de la Tecnología, 5-17
A7 - Llinars Park
08450 Llinars del Vallés (Barcelona)



NOVEDADES TÉCNICAS



Bruker Chemical & Applied Markets



UN VERDADERO CAMBIO DE JUEGO: NUEVO LC/MS/MS BRUKER EVOQ™ TRIPLE CUADRUPOLO

Sólo muy de vez en cuando hay una presentación que supone realmente un salto adelante en la tecnología. Esos hitos son siempre resultado de la innovación y desarrollo de compañías punteras y suponen un cambio de las reglas aceptadas. Ahora vamos a tener la oportunidad de vivir uno de esos saltos, con las prestaciones del nuevo LC/MS/MS Bruker EVOQ™ diseñado con un objetivo:

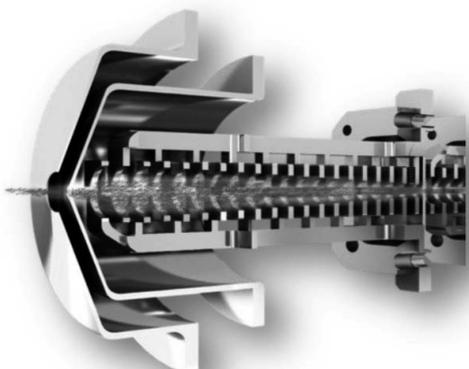
“Cuantificar con fiabilidad miles de muestras reales con el mínimo tiempo desde la inyección hasta el informe final”

Altísima sensibilidad sostenible en el tiempo: Nueva interfase ESI, con orificio de entrada de muestra, sonda ESI aislada a vacío (VIP-HESI) especial para compuestos lábiles térmicamente, y evacuación controlada activamente para una máxima transmisión y robustez en muestras reales. Evacuación Activa de los gases de la cámara de nebulización para una máxima limpieza y eficacia en la transmisión de iones. Óptica de iones de doble embudo entrelazada con Q0 lineal con sintonización universal.

Robustez para una máxima productividad. Con menos tiempos de mantenimiento y limpieza improductiva. Sintonización Universal que permite el intercambio

de métodos entre equipos, y la robustez de las condiciones incluso en las matrices más complejas. Orificio con gas a contracorriente para eliminación de la matriz antes del analizador. Analizador de geometría elíptica con lentes y sin mantenimiento. Reduzca sus mantenimientos y dolores de cabeza con un sistema realmente diseñado para la vida real.

Máxima eficacia de la muestra al informe: Reducir el tiempo y la dedicación desde la muestra hasta obtener un resultado en el informe es clave para la mayoría de laboratorios en nuestros días. De poco sirve tener sistemas rápidos cuando hay que dedicar tantas horas a la revisión uno por uno de cada resultado. Por eso herramientas como el software PACER™ van a suponer un salto adelante inimaginable. Esta herramienta selecciona los resultados, cromatogramas y cuantificación anormales destacándolos para su revisión por el operador, dando por buenos el resto de resultados. Este flujo de trabajo permite ahorrar horas dedicadas a la revisión de la calidad de los resultados.



El sistema Bruker EVOQ™ LC-TQ, Innovación con un objetivo, presenta también una nueva generación de HPLC y UHPLC de Bruker incorporando todas al innovaciones actuales y ofreciendo por primera vez una solución realmente integrada, incluso con sistema de concentración “on-line” cuando éste se requiere.

Con todo ello Bruker ofrece actualmente el rango más amplio de soluciones y herramientas para el **control de calidad alimentaria**, seguridad, aditivos y nuevos desarrollos. En el **campo medioambiental** para alcanzar las regulaciones actuales y futuras y para la **toxicología** con su excelente robustez en matrices biológicas.

Bruker es líder en GC, GCMS, LCMS e ICPMS con un amplio abanico de tecnologías MS según las necesidades analíticas del Laboratorio moderno: simple cuadrupolo (SQ), triple cuadrupolo (TQ), trampa de iones (IT), tiempo de vuelo (TOF), cuadrupolo/tiempo de vuelo (QTOF) y ultra alta resolución (FTMS) para aplicaciones de máximas prestaciones en términos de robustez, selectividad, sensibilidad y resolución.

Más información en la web:

<http://evoqms.com/home.html>

Si desea información personalizada de sus métodos contacte con nosotros en el correo:
info-bcad-spain@bruker.com

Bruker Innovación con Objetivo

Fácilmente consigue ultra-alta sensibilidad con sintonización universal.

Confíe en la robustez para muestras reales de su interfase con oficio.

Eficiente en el análisis de moléculas lábiles térmicamente.

Productivo por el mínimo tiempo en la revisión de resultados.

Bruker suministra soluciones basadas en las siguientes tecnologías, entre otras:

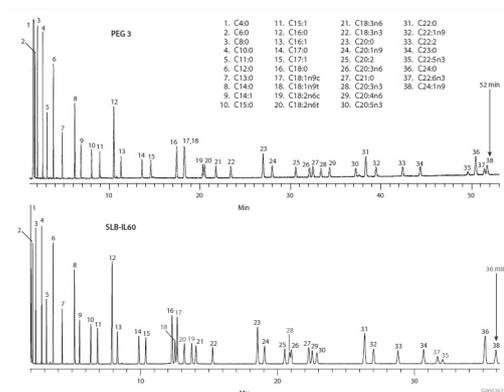
GC, GCMS, LCMS, Maldi-MS, ICPMS, Raman, FT-IR, FT-NIR, Difracción RX, Micro-RX, Fluorescencia-RX, OES, CS/ONH, NMR, EPR, MRI, TD-NMR, IMS, AFM, Microscopía, PET, Imagen.

SIGMA-ALDRICH®

NUEVA COLUMNA SLB™-IL60 SELECTIVIDAD DEL TIPO “WAX” Y ESTABLE A 300°C

La nueva columna SLB™-IL60 de líquido iónico tiene una polaridad / selectividad similar a las columnas de polietilen-glicol (PEG) (por lo general tienen en el nombre “WAX”), pero con una temperatura máxima más alta de 300°C, en comparación con las temperaturas máximas alcanzadas por la mayoría de las fases de PEG. Este aumento de la temperatura máxima permite análisis más rápidos y/o incluir analitos adicionales con mayores puntos de ebullición. La combinación de un alto límite térmico y una selectividad ortogonal a las columnas no polares las convierten en una buena opción en GC×GC. Esta columna es similar a la columna SLB™-IL59 debido a las similitudes estructurales, pero ha incrementado la inercia.

- Selectividad única.
- Resolución mejorada.
- Mejor estabilidad a altas temperaturas.



Más información:

Pedro Gutiérrez

Tel. 916572065

e-mail: pedro.gutierrez@sial.com

NUEVO CATÁLOGO DE REACTIVOS Y PATRONES DE FLUKA

El nuevo catálogo de Fluka® se entrega en una caja que contiene un catálogo de estándares analíticos y MRCs, y otro de reactivos y microbiología, separados para comodidad de uso.

1. Estándares analíticos y Materiales de Referencia Certificados

Más de 9.000 Estándares analíticos, incluyendo

- Materiales de Referencia (MR)
- Materiales de Referencia certificados (MRC)
- Ensayos Interlaboratorio

2. Reactivos analíticos y para microbiología

Más de 7.700 reactivos y solventes para

- Cromatografía
- Microbiología
- Espectroscopía
- Valoraciones / Valoración Karl Fischer

Solicite su ejemplar en:

www.sigmaaldrich.com/analytical-chromatography/analytical-catalogs.html

o llame al 900 10 13 76



ASCENTIS® EXPRESS CRECE AHORA EN 5 M

Las columnas Ascentis® Express 5 µm son una nueva opción para mejorar el rendimiento de los sistemas tradicionales de HPLC

Las columnas Ascentis® Express 5 µm están basadas en las partículas Fused® Core de 5 µm de tamaño de partícula. Ofrecen los beneficios de las separaciones más rápidas y más eficientes en comparación con las columnas basadas en partículas porosas de 3 y 5 µm, sin necesidad de preocuparse por la presión en cabeza de columna. Las columnas Ascentis® Express 5 µm son, también, extremadamente robustas, haciéndolas una opción ideal para métodos de bioanálisis por LC-MS, ya que destacan en altos flujos y alta capacidad de análisis de muestras.

www.sigmaaldrich.com/express

O consulte a nuestro Servicio Técnico.

Tel. 900 10 13 76 serviciotecnico@sial.com

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

WATERS PRESENTA LA NUEVA LÍNEA DE PRODUCTOS ANALYTICAL STANDARDS AND REAGENTS

Waters presenta la nueva línea Analytical Standards and Reagents para LC y LC/MS, una nueva línea de producto que ofrece más de 200 patrones y reactivos listos para su uso que incluyen desde patrones preformulados de una sola molécula o mezclas de compuestos hasta patrones de proteínas y glicanos.

Los nuevos patrones y reactivos ofrecen una formulación precisa, lo que disminuye la variabilidad entre análisis y permitirá a nuestros clientes obtener unos resultados más exactos y fiables.

Todos los Waters Analytical Standard and Reagents se preparan y analizan según la certificación ISO 9001, en instalaciones acreditadas bajo la norma ISO/IEC 17025, se envían en envases de alta calidad y se entregan con certificado de análisis.

Con esta nueva línea de productos, Waters refleja el compromiso de ofrecer soluciones integrales a sus clientes, maximizando el valor de las tecnologías Waters.





Para más información visite: www.waters.com/standards



Acerca de la corporación Waters (www.waters.com)

Durante más de 50 años, Waters Corporation ha contribuido al desarrollo de los laboratorios ofreciendo innovaciones prácticas y sostenibles que permiten avances significativos en áreas como la sanidad, la gestión medioambiental y la seguridad alimentaria a nivel mundial.

Gracias a una gama de productos pionera en técnicas de separación, gestión de información del laboratorio, espectrometría de masas y análisis térmico, Waters ofrece soluciones innovadoras que aseguran el éxito de sus clientes.

Con unos ingresos de 1,85 millones de dólares en 2011, Waters impulsa el descubrimiento científico y la excelencia operativa para sus clientes de todo el mundo.

Gomensoro

www.gomensoro.net

COMBUSTION ION CHROMATOGRAPHY: METROHM PRESENTA UN NUEVO SISTEMA PARA LA DETERMINACIÓN RÁPIDA Y SEGURA DE HALÓGENOS Y AZUFRE

Con el sistema Combustion Ion Chromatography (CIC), Metrohm amplía el campo de aplicación de la cromatografía iónica. CIC permite analizar todo tipo de muestras combustibles. El sistema, completamente automatizado, incluye también la preparación de las muestras y supera claramente los métodos de digestión offline en lo que respecta al volumen de muestras procesadas y la precisión y exactitud de los resultados. CIC es excelente para análisis frecuentes y habituales en diferentes sectores, pues no exige conocimientos previos específicos de la matriz de muestra ni un laborioso desarrollo de métodos. A diferencia de otros métodos alternativos, con CIC se puede indicar de modo diferenciado la concentración de los distintos halógenos.

El CIC es excelente para el control de calidad de materias primas, productos intermedios y productos finales. Por otro lado, este método también resulta ideal en el área de la protección medioambiental para controlar de forma sencilla y exacta si se cumplen las leyes, normas y disposiciones aplicables (por ej. DIN EN 228, IEC 60502-1, RoHS, WEEE,...).

Una gran variedad de matrices puede analizarse por medio del CIC. En un solo paso de análisis es posible determinar halógenos y azufre en combustibles fósiles y secundarios, lubricantes, aditivos y otros productos derivados del petróleo, así como en polímeros, pirorretardantes, textiles, productos químicos especiales, catalizadores y en muchos tipos de desechos. La cromatografía iónica con combustión cubre un amplio rango de concentraciones.



El nuevo sistema CIC de Metrohm está formado por un módulo de combustión de Analytik Jena y un módulo de absorción y CI de Metrohm. En el Combustion Module de Analytik Jena, la digestión de las muestras se controla automáticamente mediante un principio simple: un conductor óptico dirige la luz generada en la combustión del horno pirolítico a un sensor óptico. Éste mide la intensidad de la luz y, de forma proporcional a ésta, controla el avance hacia el horno de la navicilla de muestra. Con ello se optimiza la duración de la combustión para garantizar siempre una combustión completa (sin formación de hollín), pudiéndose renunciar además a la necesidad de prever tiempos de espera como márgenes de seguridad.

Gracias al control automático de la digestión de la muestra, ya no es necesario desarrollar un método para la combustión. Con un mismo «método universal» se pueden procesar tanto diferentes muestras como diferentes volúmenes de muestras.

El sistema completo, inclusive entrega, digestión y análisis de las muestras, se controla por medio de MagIC Net™, el acreditado software para cromatografía iónica. No se necesitan por tanto ni un estándar interno ni otros medios auxiliares.

Metrohm está representada en España por
Gomensoro S.A.
C/Aguacate, 15
28044 MADRID
Telf. 915086586
E-mail: ventas@gomensoro.net



**PHENOMENEX PRESENTA LA NUEVA KINETEX® CORE-SHELL DE 5 MICRAS.
LA PARTÍCULA MÁS GRANDE OFRECE MEJOR RENDIMIENTO PARA HPLC Y LC PREPARATIVO**

Phenomenex Inc. - Torrance, CA (Mayo, 2012), líder mundial en desarrollo y fabricación de nuevas tecnologías para las ciencias de la separación, anuncia la incorporación de la partícula de 5 micras en su línea de productos Kinetex® core-shell. Gracias a su mayor diámetro, la columna Kinetex® 5 micras ofrece un mejor rendimiento que las partículas convencionales totalmente porosas de 3 y 5 micras sin aumento de presión. De hecho, la nueva columna de 5 micras está diseñada para incrementar la eficacia hasta un 90% respecto a columnas totalmente porosas del mismo tamaño de partícula, sin necesidad de modificar el método en su sistema habitual de HPLC. Simplemente sustituya en su HPLC su columna habitual totalmente porosa por esta columna.

“Las columnas totalmente porosas de 5 y 3 micras se utilizan en laboratorios de todo el mundo, desde Universidades, Industrias Farmacéuticas, laboratorios de análisis de alimentos, investigación clínica, etc.”. Simon Lomas, gerente de Phenomenex de la línea de Kinetex® comenta que "Ofreciendo eficacias comparables o incluso mejores que las columnas de 3 micras, pero con presiones de columnas de 5 micras, la tecnología de Kinetex® Core-Shell de 5 micras ofrece a los cromatografistas la capacidad de sacar más provecho de sus sistemas convencionales de HPLC.”

Kinetex® de 5 micras ofrece una mayor resolución y eficacia, al mismo tiempo que amplía la escalabilidad y portabilidad de la línea de productos. Con la gama actual de tamaños de partícula disponibles, incluyendo 1.3, 1.7 y 2.6 micras, el mismo método puede ser fácilmente transferido desde UHPLC a HPLC o a LC preparativo





NOVEDADES TÉCNICAS

con la tecnología Kinetex® core-shell. Para clientes interesados en purificaciones preparativas a pequeña escala, Kinetex® de 5 micras está disponible en la tecnología preparativa Axia™ de Phenomenex. “La tecnología Kinetex® core-shell en el formato Axia ofrece un mejor rendimiento a los clientes para el desarrollo de productos farmacéuticos y naturales, que ahora pueden utilizar nuestras soluciones escalables core-shell tanto para el análisis UHPLC o HPLC como para los métodos de purificación”, explica Lomas.

Los productos core-shell de Phenomenex cumplen con la necesidad de los investigadores de mejorar los resultados y aumentar la productividad sin gastos adicionales considerables. Al proporcionar mejoras significativas en la velocidad y la eficacia de separación respecto a las columnas tradicionales totalmente porosas, la tecnología Kinetex® core-shell permite a los cromatografistas obtener mejores resultados en cualquier sistema de LC o UHPLC, así como ahorrar disolventes.

Con las partículas convencionales totalmente porosas, la eficacia disminuye a medida que aumenta el flujo, provocando una pérdida de resolución y sensibilidad, lo que ralentiza el tiempo total del análisis. La tecnología Kinetex® core-shell permite alta resolución y sensibilidad en un amplio rango de velocidades lineales sin generar una sobrepresión excesiva, así como límites de detección y cuantificación significativamente más bajos.

Phenomenex, que celebró su 30 aniversario en 2012, es un líder mundial en tecnología comprometido con el desarrollo de nuevas soluciones en química analítica que resuelvan los retos que investigadores de laboratorios de la industria, clínicos, gubernamentales y académicos se encuentran tanto en separaciones como en purificaciones. Desde descubrimiento de fármacos y desarrollos farmacéuticos hasta seguridad alimentaria y análisis medioambientales, las soluciones cromatográficas de Phenomenex aceleran la ciencia y ayudan a los investigadores a mejorar la salud y el bienestar mundial. Para más información de Phenomenex, visite www.phenomenex.com o síguenos en Twitter @Phenomenex.

Si tiene CONSULTAS sobre este comunicado contáctenos en: info@phenomenex.com



Contacto:
Micron Analítica, S.A.
Teléfono: 902 500 972
E-mail: info@micron-analitica.com

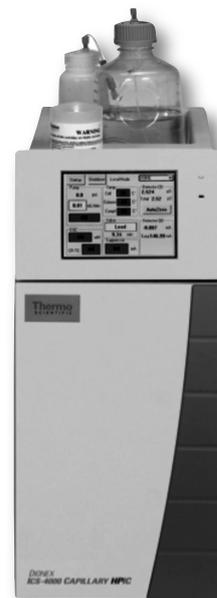


NOVEDADES Y TÉCNICAS APLICADAS

ICS-4000: EL NUEVO EQUIPO DE CROMATOGRAFÍA IÓNICA EXCLUSIVAMENTE CAPILAR

El nuevo sistema de Dionex ICS-4000 HPIC™ Capilar es el primer equipo de cromatografía iónica especialmente diseñado para el análisis en formato capilar. Esta característica le proporciona la mejor sensibilidad del mercado, desde análisis rutinarios hasta los mayores retos aplicativos.

El equipo ICS-4000 está listo para usarse 24 horas al día, 7 días a la semana, gracias a los flujos de trabajo tan bajos de la cromatografía iónica capilar. Esta ventaja, junto a la posibilidad de alcanzar altas presiones (hasta 6000 psi), hace del nuevo ICS-4000 un equipo con un alto nivel de resolución y velocidad, proporcionando una gran simplificación y una máxima eficiencia.

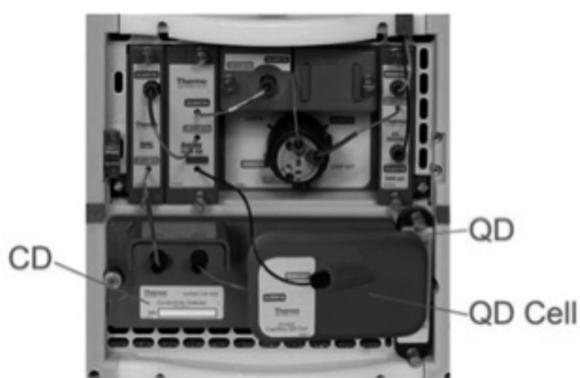


Otras ventajas de la cromatografía iónica capilar:

- Separaciones optimizadas para una mayor productividad.
- Alta presión para mejorar la resolución entre picos.
- Equipo siempre listo para el análisis, sin necesidad de equilibrado.
- Volúmenes muertos muy bajos para minimizar la dispersión entre picos y mejorar la relación señal/ruido.

Características del ICS-4000:

- Diseño compacto e integrado, con pantalla LCD táctil.
- Cromatografía HPIC™ Capilar, lista 24 horas, 7 días a la semana- siempre a punto para el análisis.
- Tecnología Reagent-Free IC, con la simplicidad de añadir sólo agua.
- IC Cube integrado, el centro de la cromatografía capilar, que usa los mismos consumibles que el ICS-5000.
- Control de temperatura que proporciona estabilidad y reproducibilidad.
- Variedad de opciones de detección: conductividad, amperometría y detector de carga.
- Software de control para el procesamiento de datos: Chromeleon 7.1 y 6.8.



El nuevo sistema ICS-4000 HPIC™ Capilar ofrece una gran variedad de opciones de detección. El sistema se puede configurar con detector de conductividad o electroquímico, además del nuevo detector de carga, una opción complementaria para la detección de iones débilmente disociados.

Detector de conductividad (CD):

- para la mayoría de aplicaciones IC.
- nuevo diseño para aplicaciones capilares.
- tecnología líder en supresión.

Detector electroquímico (ED):

- trabaja en modo de amperometría DC, amperometría de pulsos y amperometría de pulsos integrada.
- nuevo electrodo de referencia de paladio (PdH) para mejorar la reproducibilidad y tiempo de vida.

Detector de carga (QD):

- respuesta lineal para iones débilmente disociados como aminas, ácidos orgánicos o fosfato.
- respuesta equivalente para todos los iones de igual concentración.

Para más información, consultar con: **Vertex Technics S.L.**, distribuidor de Cromatografía Iónica de Thermo Scientific en España, www.vertex.es.

NORMATIVA DE CONCESIÓN DE AYUDAS PARA LA ASISTENCIA A CONGRESOS Y/O REUNIONES

CONDICIONES PARA LA CONCESIÓN DE AYUDAS PARA LA ASISTENCIA A CONGRESOS / REUNIONES DE CARÁCTER NACIONAL E INTERNACIONAL (aprobadas por la Junta de Gobierno de la SECyTA en sesión celebrada el 3 de Febrero de 2011)

1. Requisitos generales para optar a una beca concedida por la SECyTA.

- 1.1. Ser miembro de la SECyTA.
- 1.2. Encontrarse realizando la Tesis Doctoral o un Trabajo de Investigación de máster o equivalente en un Centro de Investigación.
- 1.3. No ser miembro de la plantilla laboral permanente del Centro de Investigación.

2. Para asistencia a Reuniones de la SECyTA.

- 2.1. Cláusula adicional a las anteriores: Se podrán conceder un máximo de 2 Becas por Investigador Senior (socio de la SECyTA) inscrito en la Reunión.
- 2.2. Sólo se podrá solicitar una ayuda por comunicación presentada en la Reunión y/o Congreso.

3. Para asistencia a Reuniones Internacionales.

- 3.1. Ser miembro de la SECyTA con una antigüedad superior a 1 año.
 - 3.2. Encontrarse realizando la Tesis Doctoral o Trabajo de Investigación de Máster o equivalente (como mínimo, en su segundo año) en un Centro de Investigación.
 - 3.3. No haber disfrutado de otra beca semejante concedida por la SECyTA durante la realización del Trabajo de Investigación.
 - 3.4. En el caso que el solicitante sea Doctor, no debe haber transcurrido más de dos años después de la obtención del título.
 - 3.5. Se establece la necesidad de que se trate de Congresos relacionados con el fin de la SECyTA o bien que la SECyTA figure como colaboradora o coorganizadora del Congreso.
 - 3.6. El Solicitante al que se le conceda la ayuda contrae la obligación de elaborar un informe (en español y en inglés) sobre el Congreso para su publicación en el Boletín y en la Página Web de la Sociedad. Si se conceden más de una beca para la asistencia un mismo congreso se podrá elaborar el informe de forma conjunta.
-

IMPRESO DE SOLICITUD DE AYUDAS PARA ASISTENCIA A CONGRESOS NACIONALES O INTERNACIONALES

DATOS PERSONALES DEL SOLICITANTE:

Apellidos: _____ Nombre : _____

DNI o pasaporte: _____

Dirección postal del Centro de Trabajo:

Centro de Trabajo: _____

Calle o plaza: _____ n.º: _____ letra: _____

Localidad: _____ CP: _____ Provincia: _____

Teléfono: _____ Fax: _____

Correo electrónico: _____

SOLICITA:

AYUDA para asistencia al CONGRESO/REUNIÓN _____

_____ organizado por _____

_____, que se celebra en _____

_____ durante los días _____ de _____ del 20____,

según las condiciones que figuran en el Anexo.

DATOS DE LA COMUNICACIÓN QUE SE PRESENTA:

Título: _____

_____ Exposición Oral Exposición Cartel

OTRAS SUBVENCIONES:

¿Se han solicitado otras ayudas para la asistencia al Congreso?

 SI Cite cuáles: _____ NO

DOCUMENTACIÓN QUE SE ADJUNTA:

 Carta del Director de Tesis, Proyecto o del Grupo de Trabajo, certificando los puntos 1.1. a 1.3 del Anexo. Justificante de aceptación de la Comunicación que se presenta al Congreso. *Currículum Vitae* del solicitante. Otros que considera de interés (especificar): _____

En _____, _____ de _____ de 20____

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

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

Cuota anual: 30€

- Señale la casilla correspondiente a la dirección en la que desea recibir la correspondencia.
- Puede efectuar el pago de la cuota del primer año mediante cheque bancario (adjuntándolo a esta solicitud) o mediante ingreso/transferencia a la Cuenta Corriente de "BBVA" 0182/4162/27/0201530059 (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? SI NO
(Tache lo que NO proceda)
- ¿Autoriza incluir sus datos de contacto en la sección "Nuevos Socios" del Boletín de la SECyTA? SI NO
(Tache lo que NO proceda)

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

HOJA DE INSCRIPCION

Apellidos Nombre

DNI

Domicilio particular:

Calle Núm.

Municipio Provincia.....

Código postal

Teléfono Correo electrónico

Industria u organización

Calle Núm.

Municipio Provincia.....

Código postal

Teléfono FAX Correo electrónico

DATOS BANCARIOS

Banco/Caja de Ahorros

Sucursal

Dirección Ciudad.....

D.

Con domicilio en

Y con cta. cte. / libreta de ahorro núm. / _ _ _ / _ _ _ / _ _ / _ _ _ _ _ _ _ _ /

Entidad Oficina D.C. Número de cuenta

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 2013

Firma:

Al servicio de la analítica



Health & Health Protection

- Drug Development & Production
- Pre- & Clinical Studies for New Drugs
- Quality Control of final Drug Products
- Therapeutic Drug Monitoring
- Doping Screening and Drugs of Abuse Assessment
- Monitoring of Biomarkers for Diseases e.g. for Cancer
- Solvents & Contaminants in Personal Care Products
- Workplace Air Monitoring for Industrial Hygiene or Air Monitoring in Schools

Food & Beverages

- Quality Control Food Production
- Nutritional Facts of Foods
- Food Monitoring
- Drinking Water Contaminants
- Alcohol content of wine, spirits
- Natural flavour labelling
- Water content of food

Environment

- Industrial Pollution Control
- Water Monitoring
- Urban Air Control (NO_x, SO_x, Ozone)
- Pollution of Beaches & Air due to Oil Spills
- Research

High end Science

- Space Research
- Metabolomic Systems
- Proteomics, Peptide Mapping
- Material Science

Products of Daily Life

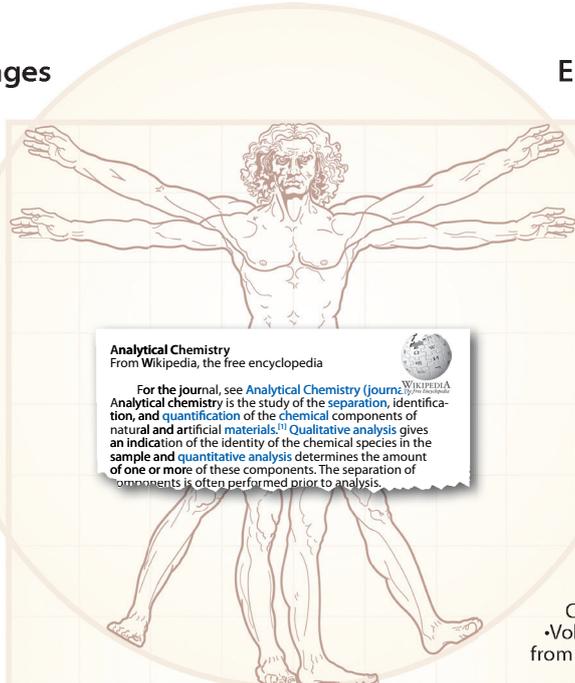
- Metal content in plastics such as toys
- Dyes and softeners leachable from plastic ware
- Cosmetics & Personal Care Products
- Volatiles & Leachables from Materials

Industry & Production

- Quality Control of Raw Materials
- Process Control & Optimisation
- Product Purification
- Final Product QC
- Industrial Hygiene

Traffic

- Biofuel, Fuel & Lubricant Composition
- Car Interiors
- Car Exhaust Emission Sampling
- Monitoring Road Side Pollution
- Road Works



Respaldo todas sus necesidades de Analisis y Purificacion

- Columnas/Accesorios HPLC
- Tubos/Cartuchos/Manifolds SPE
- Columnas/Rellenos Cromatografía Flash
- Columnas/Liners/Purificadores en GC
- Reactivos Analítica
- Fibras/Soportes SPME
- Estandares Químicos
- Productos para Valoraciones

Mas informacion, llamando al 900 101 376 / 91 657 20 65 o serviciotecnico@sial.com

Sigma-Aldrich Quimica
Ronda de Poniente, 3
28760 TRES CANTOS

sigma-aldrich.com/analytical

PREMIADO CON EL PITTCOON EDITOR'S AWARD
DE ORO 2012 AL MEJOR PRODUCTO NUEVO

waters.com

PRESENTAMOS ACQUITY UPC²

LAS SEPARACIONES MÁS DIFÍCILES.
AHORA, EXPONENCIALMENTE
MÁS FÁCILES.

UltraPerformance Convergence Chromatography.™

Con el sistema ACQUITY UPC²™ de Waters, podrá finalmente preparar, analizar y comprender compuestos que eran demasiado complejos para las tecnologías LC y GC tradicionales. Ahora, yendo más allá de las técnicas de LC y GC, estará usted abriendo las puertas para afrontar nuevos retos, haciendo de lo imposible, una cuestión de rutina. Esto es ACQUITY UPC², un mundo de posibilidades exponenciales. **Para conocer las posibilidades en su campo, visite waters.com/UPC2.**



Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

Ciencias de la vida y farmacéutica | Alimentación | Medio ambiente | Clínica | Análisis químico