

CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

SECYTA

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE
CROMATOGRAFÍA
Y TÉCNICAS AFINES

BOLETIN DE LA SECYTA
VOLUMEN 34, N.º 2 (2013)
34
WWW.SECYTA.ORG

“ LA CIENCIA DE LA SENSIBILIDAD ”



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



CROMATOGRAFÍA Y TÉCNICAS AFINES

Madrid, Diciembre de 2013 Vol. 34, núm. 2

ISSN 1132-1369

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

ÍNDICE

| | |
|----|--|
| 46 | EDITORIAL |
| | ARTÍCULO |
| 47 | Contaminantes emergentes relacionados con el envasado y conservación de alimentos. Determinación en productos lácteos <i>Clara Esteve, Laura Herrero, Belén Gómara</i> |
| | NOTICIAS DE LA SECyTA |
| 57 | XIII Reunión científica de la SECyTA (42ª Reunión científica del GCTA) |
| 59 | IX Edición Premios “José Antonio García Domínguez” |
| 61 | 13ª Asamblea General de la SECyTA |
| 73 | Junta de Gobierno de la SECyTA (2013) |
| 74 | Nuevos socios |
| | INFORMACIONES |
| 75 | Congresos celebrados |
| 81 | Calendario de actividades |
| | INFORMACIÓN BIBLIOGRÁFICA |
| 82 | Artículos de interés |
| | DE NUESTRAS EMPRESAS COLABORADORAS |
| 86 | 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

Estimados socios de la SECyTA,

Quiero celebrar con vosotros el éxito alcanzado en la XIII Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (42ª Reunión del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines) que tuvo lugar del 8 al 11 de octubre de 2013 en el Puerto de la Cruz, Tenerife. Durante esos tres días tuvimos un programa científico muy intenso, con más de 150 comunicaciones científicas, 48 de ellas en forma oral y con 4 conferencias plenarias impartidas por prestigiosos investigadores nacionales e internacionales. Además, disfrutamos de un excelente marco en el que todos los asistentes tuvimos la oportunidad de intercambiar conocimientos, debatir ideas y asistir a las últimas novedades en el desarrollo de las técnicas de separación.

A pesar de los tiempos tan difíciles por los que estamos atravesando y lo complicado que empieza a ser conseguir financiación para asistir a nuestras reuniones, he sentido una gran alegría al comprobar que la asistencia a la reunión ha sido muy numerosa y, como ya es habitual, con una participación muy elevada, superior al 30%, 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 realizando 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 más de 40 becas concedidas a los jóvenes investigadores por la Sociedad, la continuidad de los premios José Antonio García Domínguez y el accésit del Club de usuarios de SPME y, sobre todo, el enorme trabajo realizado y la gran dedicación de los Drs. Miguel Ángel Rodríguez y Alejandro Cifuentes que, junto a los comités organizador y científico, han conseguido una organización científica perfecta y un programa de actividades sociales inmejorables. Quiero hacer extensivas mis felicitaciones a la secretaria técnica de la reunión, “Viajes Viaconte”, que ha realizado también una gran labor.

Durante la Reunión, se celebró la asamblea anual de la SECyTA, donde se llevaron a cabo elecciones para renovar parte de la Junta de Gobierno de la Sociedad. Salieron elegidos la Dra. Yolanda Pico García y el Dr. Jordi Díaz Ferrero, como vicepresidenta y tesorero, respectivamente, y los Drs. Juan Vicente Sancho Llopis, Ana M^a García Campaña y Miguel Ángel Pérez Alonso como vocales. Durante este acto, despedimos a las Dras. Ana Agüera López y Coral Barbas Arribas que han formado parte de la Junta durante cuatro años, a las que quiero expresar mi agradecimiento por su trabajo y dedicación a la SECyTA durante estos años. El acta de la asamblea anual de la SECyTA 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 la información sobre los temas allí tratados. Así mismo, encontrareis 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 tiene lugar el encuentro de los socios, el conocimiento de los últimos resultados de nuestras investigaciones, la discusión de los resultados más novedosos presentados, la presentación de las últimas novedades en instrumentación analítica, la incorporación de socios jóvenes, etc, y es por ello que nos esforzamos en su organización, haciéndolas lo más atractivas posibles. El próximo año se celebrarán las XIV Jornadas de Análisis Instrumental en el marco de la Expoquimia en Barcelona, entre el 1 y el 3 de octubre de 2014 y, como es habitual, nuestra Reunión anual científica se realizará dentro de ella. En esta edición, la SECyTA se encarga de su organización en colaboración con otras sociedades científicas como SEQA, SEEM, SEA y SEProt. Tenemos el reto de organizar unas jornadas atractivas que den a conocer la excelente química analítica e instrumental que se lleva a cabo en España. Se está ultimando la página web, que estará disponible en breve, donde se recogerán las actividades de las JAI. Creo que van a ser unas jornadas interesantes y provechosas para todos nosotros y os animo a todos a asistir a ellas.

María José González Carlos
Presidenta de la SECyTA

ARTÍCULOS

Contaminantes emergentes relacionados con el envasado y conservación de alimentos. Determinación en productos lácteos.

Clara Esteve*, Laura Herrero, Belén Gómara

Instituto de Química Orgánica General (CSIC), Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid, España.

*e-mail: clara.esteve@iqog.csic.es; tlf: 912587507

RESUMEN

Los alimentos constituyen la principal vía de exposición humana a muchos contaminantes, entre los que se encuentran aquellos procedentes del envasado y la conservación de los mismos. Dentro de los alimentos, los productos lácteos son la base de una dieta equilibrada y son altamente consumidos por la población. Esto hace que compuestos tóxicos como ftalatos, bisfenol A y derivados, parabenos y fotoiniciadores, que son disruptores endocrinos, lleguen de forma mayoritaria al hombre a través de la ingesta. Es por ello que en los últimos años ha surgido un gran interés por desarrollar métodos analíticos que permitan su determinación en muestras alimentarias. En esta revisión bibliográfica se discuten y comparan los diferentes tratamientos de muestra empleados en la extracción de contaminantes procedentes del envasado y conservación de productos lácteos y las técnicas analíticas utilizadas para la separación, caracterización y cuantificación de estos compuestos. También se aborda la problemática que existe con los blancos del procedimiento en el análisis de este tipo de compuestos.

INTRODUCCIÓN

El envasado y la conservación de los alimentos como fuente de compuestos tóxicos para el hombre ha sido muy poco estudiada en comparación con otros contaminantes ambientales y alimentarios bien conocidos, e incluso regulados, como pesticidas, dioxinas, bifenilos policlorados (PCBs), polibromodifenil éteres (PBDEs), etc. Sin embargo, hoy en día es bien sabido que tanto el envasado como la conservación de los alimentos contribuyen a la exposición humana a xenobióticos (Grob y col., 2006). Esto ha hecho que estos compuestos empiecen a ser considerados como una potencial fuente de contaminación alimentaria.

Los materiales en contacto con alimentos (FCM, del inglés *food contact materials*) son aquellos materiales que de manera intencionada pueden ser puestos en contacto con los alimentos destinados al consumo humano. Los ejemplos más obvios son los envases alimentarios,

que engloban tanto los materiales empleados en el procesamiento de los alimentos, como en el transporte, la preparación y el consumo (Bradley y Castle, 2010) de los mismos. Los envases alimentarios pueden estar fabricados con plástico, papel o cartón, gomas, metal, vidrio, etc. Para fabricar estos materiales se emplean varios miles de compuestos químicos diferentes, entre los que se incluyen monómeros y otras sustancias iniciadoras (necesarias para la fabricación de plásticos), catalizadores, aditivos para modificar las propiedades de los productos finales, ingredientes de tintas, recubrimientos, adhesivos, etc. (Bradley y Castle, 2010). Cualquier compuesto químico presente en estos materiales tiene el potencial de transferirse a los alimentos con los que está en contacto. Esta transferencia se conoce como migración química y puede tener un gran impacto sobre la calidad del alimento, afectando a sus características organolépticas. Además, esta migración también puede afectar a la seguridad alimentaria, ya que muchas de las sustancias empleadas en los FCM pueden ser dañinas para el consumidor.

Entre los compuestos presentes en los FCM más estudiados se encuentran los ftalatos, los parabenos, el bisfenol A y sus derivados y los fotoiniciadores (Figura 1). Los ftalatos (dialquil o alquil alquil ésteres del ácido ftálico) son una clase de plastificantes que se producen desde los años 30 y que se emplean para imprimir flexibilidad y durabilidad a plásticos como el policloruro de vinilo (PVC). De entre los ftalatos disponibles comercialmente, el dietilhexil ftalato (DEHP) es el más empleado, con un total del 50% de la producción. Los ftalatos se metabolizan muy rápido en el cuerpo humano formándose monoésteres del ácido ftálico (metabolitos de ftalatos) en tan solo unas pocas horas. En los últimos diez años, distintos ftalatos y metabolitos de ftalatos han sido detectados en leches comerciales (Casajuana y Lacorte, 2004; Mortensen y col., 2005; Yan y col., 2011; Farajzadeh y col., 2012; Miclean y col., 2012), en fórmulas infantiles (Casajuana y Lacorte, 2004; Mortensen y col., 2005; Khedr, 2013) y en leches maternas (Mortensen y col., 2005; Shen y col., 2009; Schlumpf y col., 2010; Fromme y col., 2011; Guerranti y col., 2013) en distintos países de todo el mundo.

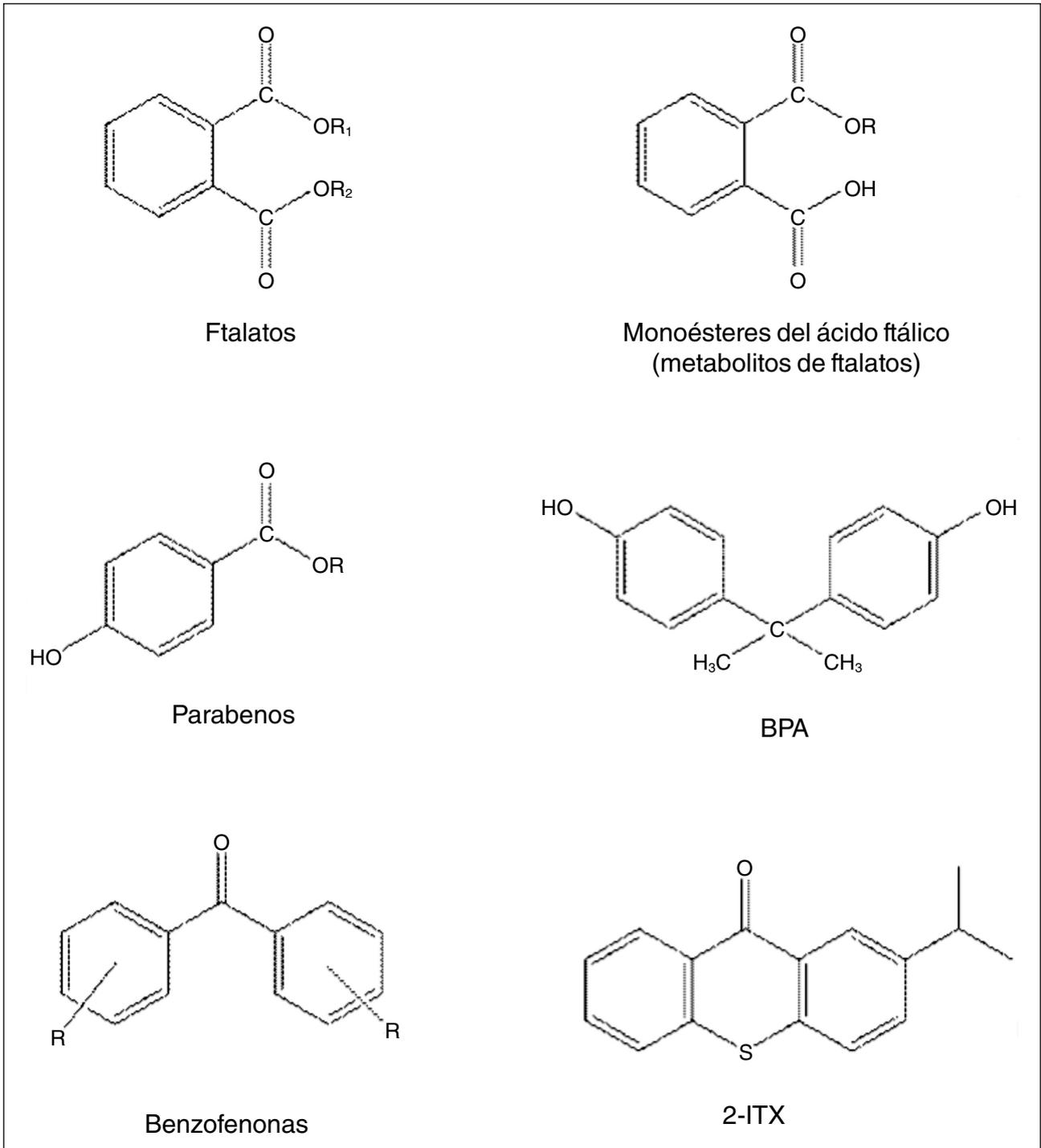


Figura 1. Estructuras generales de algunos compuestos tóxicos relacionados con el envasado y conservación de alimentos.

El bisfenol A (BPA, 2,2-bis(4-hidroxifenil)propano) se emplea con intensidad desde los años 50 como monómero en la producción de policarbonatos y resinas epoxi, los cuales se usan para hacer una gran variedad de envases plásticos entre los que se encuentran biberones y botellas. Se ha descrito en la bibliografía la capacidad del BPA de migrar del polímero plástico al alimento cuando el envase está en contacto directo con el mismo (Salafranca y col., 1999). Al igual que con los ftalatos, en la bibliografía se pueden encontrar multitud de trabajos en los que se determina el BPA en leche comercial (Maragou y col., 2006; Yan y col., 2009; Malone y col., 2010; Mudiam y col., 2011; Molina-García y col., 2012; Feshin y col., 2012; Farajzadeh y col., 2012), leche materna y calostro (Ye y col., 2006; Kuroto-Niwa y col., 2007; Ye y col., 2008; Cariot y col., 2012; Ye y col., 2013), fórmulas infantiles (Cao y col., 2008; Cunha y col., 2011; Molina-García y col., 2012) y productos lácteos de distinta naturaleza (Sajiki y col., 2007; Gyllenhammar y col., 2012). Aunque menos nombrados, el bisfenol B (BPB, 2,2-bis(4-hidroxifenil)butano) y el bisfenol F (BFF, una mezcla de los isómeros 2,2', 2,4', y 4,4'-dihidroxidifenilmetano), también son empleados en la producción de resinas epoxi y están considerados como potenciales contaminantes de alimentos (Goodson y col., 2002; Cunha y col., 2011). Además, se ha descrito la presencia en productos lácteos de bisfenol A diglicidil éter (BADGE) y de bisfenol F diglicidil éter (BFDGE) (Casajuana y Lacorte, 2004; Sajiki y col., 2007; Cao y col., 2009), compuestos químicos usados en la síntesis de resinas epoxifenólicas, las cuales, a su vez se emplean en el recubrimiento interno de latas que contienen alimentos para protegerlos del contacto directo con el metal.

Por su parte, los parabenos o ésteres del ácido *p*-hidroxibenzoico se usan ampliamente como conservantes antimicrobianos en alimentos, cosmética y productos farmacéuticos. Los que se utilizan en mayores cantidades en alimentación son el metil parabeno (E218), el etil parabeno (E214) y el propil parabeno (E216). El número de estudios que aparecen en la bibliografía relativos a la presencia de parabenos en muestras de leche o productos lácteos es considerablemente inferior que el de los llevados a cabo con los ftalatos o el BPA. Aun así, recientemente se han detectado distintos parabenos en leches comerciales (Ye y col., 2008; Cao y col., 2013), en leche materna (Schlumpf y col., 2010; Ye y col., 2013) y en otros productos lácteos (De Luca y col., 1995).

Por último, los fotoiniciadores son empleados como iniciadores en el proceso de polimerización para proteger las tintas empleadas en envases de plástico, papel o cartón, de la radiación UV. Entre los fotoiniciadores analizados en productos lácteos se encuentran la 2-isopropiltioxantona (2-ITX), el 2-etilexil-4-dimetilaminobenzoato (EHDAB), el etil-4-dimetilaminobenzoato (EDAB), la benzofenona (BP), la 1-hidroxiciclohexil fenilcetona (Irgacure 184), la 2-metil-1-[4-(metiltiol)fenil]-2-(4-morfolinil)-1-propanona (Irgacure 907), el óxido de (2, 4, 6-trimetilbenzoil)difenilfosfina (TPO) y la 2-bencil-2-(dimetilamino)-1-(4-morfolinofenil)-1-butanona (Irgacure 369). Fue en 2005 cuando se alertó de la aparición de estos contaminantes en alimentos, habiendo aparecido publicados desde entonces algunos estudios tanto en leche comercial (Gil-Vergara y col., 2007; Sagratini y col., 2008; Shen y col., 2009) como en fórmulas infantiles (Mudiam y col., 2011).

Durante muchos años, todos estos compuestos no fueron considerados peligrosos para los seres humanos debido a su baja persistencia y a que en estudios preliminares mostraron una baja toxicidad. Sin embargo, en los últimos años se ha incrementado el número de estudios que indican que los ftalatos, los parabenos y el BPA pueden ser tóxicos, ya que han demostrado ser disruptores endocrinos y tener efectos indeseados sobre la fertilidad y la reproducción (Blount y col., 2000; Vom Saal y Hughes, 2005; Latini y col., 2006; Benson y col., 2009). Además, algunos de ellos pueden ser causantes de diferentes tipos de cáncer (Wams, 1987; Wetherill y col., 2002). Estos estudios han hecho que estos compuestos hayan pasado a ser considerados contaminantes emergentes. De hecho, la necesidad de controlar los efectos de los FCM en el hombre está considerada por la legislación europea en diferentes documentos que incluyen restricciones y limitaciones en el uso de ftalatos, parabenos, bisfenol y fotoiniciadores (EC, 2002; EC, 2006; EC, 2007; EFSA, 2010; JECFA, 2007). Dado que tanto los gobiernos como los consumidores demandan alimentos cada vez de mejor calidad que cumplan los criterios de seguridad, los límites legislativos de los contaminantes alimentarios tienden a ser cada vez más bajos, requiriéndose metodologías cada vez más sensibles y fiables.

En esta revisión, se pretende dar una visión global de la problemática del análisis de contaminantes derivados del envasado y conservación de alimentos en productos lácteos, incidiendo tanto en las etapas de tratamiento de muestra como de determinación instrumental y se discutirán las posibles estrategias para disminuir la presencia de estos compuestos en los blancos del procedimiento.

EXTRACCIÓN Y PURIFICACIÓN DE CONTAMINANTES PRESENTES EN PRODUCTOS LÁCTEOS

El análisis de contaminantes en productos lácteos, dada la complejidad de la matriz, requiere un tratamiento de muestra que puede ser largo y complejo (Ridgway y col., 2007). La leche y los productos lácteos contienen una cantidad variable de lípidos y proteínas que requieren unos pasos previos de eliminación antes de la determinación instrumental de los compuestos de interés. La eliminación de los lípidos es un paso esencial en estas muestras, ya que éstos pueden reducir de forma significativa el rendimiento de las determinaciones por cromatografía de líquidos (LC) y de gases (GC). En LC los lípidos afectan a la superficie activa de la fase estacionaria reduciendo el poder de resolución de la columna, mientras que en GC acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) los lípidos se acumulan en el sistema de inyección, la columna y la fuente de ionización (Ballesteros-Gómez y col., 2009). La dificultad de la eliminación de lípidos recae en que muchos de los contaminantes relacionados con el envasado y la conservación de alimentos tienen una polaridad similar a éstos. Los lípidos se eliminan siguiendo diferentes estrategias como, por ejemplo, mediante exclusión molecular usando cromatografía de permeación en gel (GPC) (Sharman y col., 1994; Schlumpf y col., 2010; Gyllenhammar y col., 2012), extracción líquido-líquido (LLE) (Sorensen, 2006) o extracción en fase sólida (SPE) con cartuchos rellenos de Florisil® (Casajuana y Lacorte, 2004; Fromme y col., 2011). Las proteínas se separan de forma habitual por adición de disolventes orgánicos como acetonitrilo (Bagnati y col., 2007; Cao y col., 2008; Fromme y col., 2011) o llevando la disolución a condiciones ácidas usando ácido trifluoroacético (TFA) en concentraciones de entre el 2,5 y el 10% (Cunha y col., 2011; Mudiam y col., 2011; Molina-García y col., 2012). En estas condiciones, las proteínas se desnaturalizan y se vuelven insolubles, siendo fácil separarlas por centrifugación.

Cuando se analizan metabolitos de estos contaminantes, en muchos casos, como las muestras de leche materna, los analitos de interés se encuentran en forma de conjugados glucuronidados o sulfatados (Yusa y col., 2012). Entonces es necesario llevar a cabo una deconjugación, que se realiza de forma selectiva mediante el uso de enzimas hidrolíticas, como la enzima β -glucuronidasa, empleada en la extracción de BPA (Ye y col., 2006) y metabolitos de ftalatos (Hines y col., 2009) de leche humana.

EXTRACCIÓN BASADA EN EL USO DE DISOLVENTES

La LLE es una técnica clásica que todavía se utiliza de forma amplia en la extracción de contaminantes de productos lácteos líquidos (Goodson y col., 2002; Sun y col., 2004; Mortensen y col., 2005; Sorensen, 2006; Kuroto-Niwa y col., 2007; Malone y col., 2010; Fromme y col., 2011; Li y col., 2011; Cao y col., 2013; Guerranti y col., 2013). Se basa en la solubilidad relativa de los analitos en dos fases inmiscibles. Acetonitrilo, hexano y cloroformo son los disolventes que se usan de forma más habitual para la extracción. A continuación se separan las fases mediante centrifugación en presencia de una sal y se elimina la humedad de la fase orgánica mediante la adición de sulfato sódico anhidro. Sin embargo, esta técnica es larga y laboriosa y requiere grandes volúmenes de disolventes. La extracción sólido-líquido (SLE), de forma análoga a la LLE, se basa en el empleo de disolventes orgánicos, pero en este caso sobre muestras sólidas como las leches en polvo, las fórmulas infantiles o los quesos (De Luca y col., 1995; Goodson y col., 2002; Sajiki y col., 2007) y presenta los mismos inconvenientes que la anterior.

La dispersión de la matriz en fase sólida (MSPD) es una técnica empleada para la extracción de analitos en matrices sólidas, semi-sólidas o viscosas. La muestra se mezcla con un relleno como C_{18} , sulfato sódico, sílice o tierra de diatomeas que se empaqueta en una columna antes de la elución. Así se forma una estructura porosa que permite que el solvente penetre en la matriz extrayendo los analitos. La MSPD es una técnica sencilla y versátil que permite la extracción y la purificación de la muestra en un solo paso dependiendo del adsorbente empleado. Esta técnica se ha empleado, por ejemplo, en la extracción de BPA en leche (Shao y col., 2007).

La extracción mediante líquidos presurizados (PLE) es una técnica basada en el uso de disolventes líquidos a temperaturas (40-200°C) y presiones (1000-2500 psi) elevadas. Bajo estas condiciones, los disolventes tienen un poder de elución superior, lo que permite aumentar la eficacia en la extracción. La optimización de las condiciones de extracción en PLE incluyen el estudio del tipo de disolvente, el agente dispersante, la temperatura, la presión, el tiempo de extracción y el número de ciclos (Ferrer y col., 2011). Esta técnica ha sido utilizada con muy buenos rendimientos para la determinación de BPA en leche y fórmulas infantiles (Ferrer y col., 2011), de ftalatos en leche materna (Fromme y col., 2011), o de fotoiniciadores en leches comercializadas en distintos envases (Gil-Vergara y col., 2007).

Extracción en fase sólida

La SPE es uno de los métodos más habituales de preparación de muestras para extraer y purificar analitos presentes en matrices líquidas. Aunque la forma más habitual de realizar este procedimiento es *off-line*, también se han propuesto algunas estrategias que incorporan SPE *on-line* (Ye y col., 2006; Ye y col., 2008; Yan y col., 2009; Cariot y col., 2012; Ye y col., 2013). En esta técnica existen algunos parámetros críticos que deben ser elegidos con cuidado y optimizados, como son el relleno, el disolvente de elución, el volumen de muestra y las condiciones de pH. Durante mucho tiempo, y aún de forma habitual, se han utilizado rellenos de sílice convencional (como C₈, C₁₈ o incluso C₃₀) (Casajuana y Lacorte, 2004; Sum y col., 2004; Maragou y col., 2006; Ye y col., 2006; Cao y col., 2008; Ye y col., 2008; Cao y col., 2009; Yan y col., 2009; Malone y col., 2010; Cariot y col., 2012; Feshin y col., 2012; Molina-García y col., 2012; Khedr, 2013), siendo más eficiente que otros rellenos como poliestireno-divinilbenceno (PS-DVB) o PS-DVB hidroxilado en la extracción, por ejemplo, de BPA en muestras de leche (Maragou y col., 2006). Sin embargo, en los últimos años están apareciendo nuevos rellenos (Vicent y col., 2012) entre los que se encuentran los materiales poliméricos de balance hidrofílico-hidrofóbico (como el Oasis[®] HLB) (Mortensen y col., 2005; Kuroto-Niwa y col., 2007; Sajiki y col., 2007; Shen y col., 2009). Estos rellenos presentan la ventaja de tener un área específica superior a los rellenos de sílice convencional, la posibilidad de secarse durante el proceso de extracción sin reducir el rendimiento de la misma y una gran estabilidad en un amplio intervalo de pH. Otra alternativa son los rellenos de intercambio iónico (Mino y col., 2008; Cao y col., 2009; Molina-García y col., 2012). Las principales ventajas de esta técnica son, por un lado, una alta selectividad, que permite obtener buenas recuperaciones, y por otro, el uso de una menor cantidad de disolventes que otras técnicas como la LLE convencional o la MSPD.

En los últimos años se ha empezado a aplicar la metodología basada en QuEChERS (del inglés *Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged and Safe*). Se basa en un proceso de extracción/purificación en dos etapas. En la primera de ellas se lleva a cabo una LLE favorecida por la adición de determinadas sales que reducen el contenido de agua de las muestras y mejoran la separación de las fases (como el MgSO₄ y el NaCl), seguida de una segunda etapa de purificación de los extractos por SPE dispersiva (dSPE) utilizando adsorbentes como PSA (amina primaria/secundaria), C₁₈ o carbón gráfico. Entre las ventajas que ofrece se encuentran su simplicidad, su bajo coste, su elevado rendimiento y su relativamente alta eficacia con

un menor número de pasos. Esta técnica se ha aplicado, por ejemplo, para el aislamiento y la detección simultánea de once fotoiniciadores en alimentos infantiles que contenían leche (Gallart-Ayala y col., 2011).

Por otro lado, el uso de rellenos altamente selectivos es una herramienta muy útil para el aislamiento de contaminantes traza en muestras alimentarias complejas, permitiendo realizar de forma simultánea la extracción y la eliminación de compuestos indeseados. Aunque existe una gran variedad de rellenos selectivos, los polímeros de impronta molecular (MIPs) han sido los únicos aplicados a muestras de lácteos. Esta técnica se basa en el uso de polímeros sintéticos que tienen la capacidad de reconocer molecularmente el analito de interés. Los MIPs han sido aplicados, por ejemplo, para la extracción de BPA de leche utilizando como moléculas molde sus análogos 4,4'-hidroxibifenil DHBP, tetrabromo bisfenol A (TBBPA) y BP (Zhan y col., 2012), o BPA dimetacrilato (Alexiadou y col., 2008), evitando así la contaminación de la muestra. Una nueva estrategia en este campo es el uso de polímeros de impronta molecular magnéticos (M-MIPs), basados en el uso de partículas magnéticas que permiten una captura controlable y suprimen el paso de eliminación, como en el estudio llevado a cabo por Ji y col. (2009), en el que emplean esta técnica para la extracción de BPA en muestras de leche. El método propuesto no sólo proporciona un análisis rápido y fiable, sino que también da solución a problemas típicos de otras técnicas como la SPE, tales como el empaquetado del relleno, el tiempo requerido y la carga de grandes volúmenes de muestra. Sin embargo, la aplicación de estos rellenos selectivos al análisis de alimentos es todavía limitada, debido principalmente a que el desarrollo de estos materiales requiere mucho tiempo y son caros y complejos.

Otras técnicas de extracción menos habituales

La microextracción en fase sólida (SPME) se basa en el uso de una fibra de sílice fundida recubierta con una fase estacionaria adecuada que bien se sumerge directamente en una muestra líquida o se coloca en un espacio de cabeza sobre una muestra líquida o sólida en un vial (HS-SPME). Se ha aplicado para el aislamiento de ftalatos (Feng y col., 2005; Miclean y col., 2012) y de BPA (Liu y col., 2008; Mudiam y col., 2011) en leche comercial. Dado que se trata de una técnica miniaturizada, presenta la ventaja de emplear un reducido volumen de disolventes orgánicos. Sin embargo, las fibras de SPME resultan caras y los tiempos necesarios para alcanzar el equilibrio entre la fibra y los analitos de interés tienden a ser largos, lo que en ocasiones se ha traducido en medidas poco exactas. En el caso concreto de muestras de leche, se ha

observado que la eficacia en la extracción de la fibra de SPME dependía del contenido de fibra de la muestra (Feng y col., 2005). En este trabajo, este inconveniente se solucionó combinando los métodos de adición estándar y de estándar interno para el análisis de leches con diferente contenido de grasa.

La microextracción líquido-líquido dispersiva (DLLME) es una técnica que se basa en la formación de una disolución turbia formada por la adición rápida de una mezcla de disolventes dispersivos a la muestra acuosa. Las pequeñas gotas que se encuentran dispersas en la muestra se recogen en el fondo de un tubo cónico por centrifugación. Esta técnica ha sido empleada para el aislamiento de ftalatos en leche comercial (Yan y col., 2011; Farajzadeh y col., 2012) y BPA y BPB en fórmulas infantiles (Cunha y col., 2011), consiguiendo altos rendimientos con un mínimo consumo de muestra y disolventes.

Reacción de derivatización

Cuando los analitos de interés van a determinarse por GC y no son suficientemente volátiles, se requiere un paso de derivatización. La derivatización no sólo mejora la sensibilidad del análisis, también mejora la resolución entre picos y, en ocasiones, acorta los tiempos de análisis. Aunque se han descrito numerosos métodos de derivatización en la bibliografía (Knapp, 1979), en la práctica se utilizan tan solo unas pocas reacciones. Las reacciones de derivatización que se han empleado de forma más habitual en el análisis de contaminantes provenientes de los FCM en productos lácteos han sido la silylación mediante N,O-bis(trimetilsilil)trifluoroacetamida (BSTFA) pudiendo además contener trimetilclorosilano (TMCS), 1,4-ditioeritritol (DTE) o piridina (De Luca y col., 1995; Cao y col., 2008), la acetilación mediante adición de anhídrido acético en presencia de piridina (Goodson y col., 2002; Cunha y col., 2011; Gyllenhammar y col., 2012) y la esterificación mediante la adición de cloroformiato etílico (Mudiam y col., 2011) o alcohol isopropílico (Feshin y col., 2012). Estas reacciones se suelen llevar a cabo añadiendo al extracto seco entre 100 y 200 µL del agente derivatizante y manteniendo la mezcla a temperaturas de hasta 80°C empleando tiempos de reacción de entre unos pocos segundos hasta 1h.

DETERMINACIÓN INSTRUMENTAL

La determinación de contaminantes procedentes del envasado y conservación de productos lácteos requiere el uso de técnicas altamente sensibles y selectivas, ya que habitualmente se encuentran a niveles de trazas. La com-

plejidad de las muestras y la necesidad de separar un número creciente de analitos hace que de forma habitual se emplee una técnica de separación cromatográfica como la LC o GC. El acoplamiento de estas técnicas a la MS se ha convertido en una herramienta esencial ofreciendo una alta sensibilidad y selectividad. Otras técnicas, como el análisis por inyección de flujo (FIA) con detección fluorimétrica (Molina-García y col., 2012) o el ensayo por inmunoabsorción ligado a enzimas (ELISA) (Kuroto-Niwa y col., 2007), han sido empleadas para este tipo de análisis, pero de forma menos general.

La elección de una u otra técnica cromatográfica depende de la polaridad, volatilidad y estabilidad térmica de los analitos de interés. Por ejemplo, los ftalatos, debido a su alta volatilidad, estabilidad y baja polaridad, han sido tradicionalmente analizados mediante GC, aunque también existen ejemplos de análisis de los mismos mediante LC. Otros analitos, como la benzofenona, también han demostrado, en estudios comparativos, mejor sensibilidad cuando eran analizados por GC (Sagrati y col., 2008). Sin embargo, analitos que presentan una mayor polaridad, como parabenos o BPA, por norma general, se analizan por LC. Por otro lado, la derivatización de estos compuestos para convertirlos en compuestos más volátiles permite también su separación mediante GC, utilizando reacciones como las que se han mencionado anteriormente. En ocasiones, la elección de una u otra técnica cromatográfica puede ser un paso crítico, pero en muchas otras, ambas técnicas han demostrado ser eficientes, como en el caso de la determinación de ITX y EHDAB en muestras de leche (Gil-Vergara y col., 2007).

Cromatografía de líquidos (LC)

La parte más importante de un método de LC es la columna, la cual permite la separación de los compuestos. Las columnas convencionales de HPLC se basan en el uso de partículas de sílice cuya superficie se ha modificado con cadenas alquílicas, siendo la más habitual la C₁₈. Sin embargo, para el análisis de metabolitos de ftalatos algunos autores han propuesto el uso de fases estacionarias con anillos fenilo que aporta una selectividad especial (Calafat y col., 2004; Mortensen y col., 2005; Mudiam y col., 2011). En algunas ocasiones, como en el caso de compuestos isobáricos, que no se pueden diferenciar por MS, es esencial tener una buena separación cromatográfica. Un ejemplo de esta problemática es la separación de los isómeros del fotoiniciador ITX (2-ITX y 4-ITX) (Bagnati y col., 2007). En este caso se compararon dos columnas cromatográficas con diferentes rellenos, una columna Luna C₈ (Phenomenex) y una columna Discovery ZR-PS (Supelco), basada en partículas de

zirconio modificadas con poliestireno, ofreciendo tan solo la segunda columna una resolución suficiente como para poder cuantificar ambos isómeros.

Las fases móviles más usadas son el agua combinada con acetonitrilo o con metanol. Además, de forma habitual, se emplean modificadores como el acetato amónico, el ácido fórmico y el ácido acético, para mejorar la eficacia de la ionización de los analitos. Sin embargo, especialmente en el acoplamiento a MS, a veces la presencia de modificadores puede dar lugar a un descenso de la señal, como en el caso del BPA en presencia de amonio al 0,01% o ácido acético al 0,01% (Maragou y col., 2006). Existe, además, algún ejemplo en el que se utiliza una fase móvil micelar (conteniendo dodecil sulfato sódico (SDS) 0,2M) para la separación de BPA y BADGE procedentes de un extracto de leche (Szymanski y col., 2006), aunque esta aplicación queda restringida a los análisis sin acoplamiento a MS. En muchas ocasiones, la separación se lleva a cabo a temperatura ambiente, aunque se ha demostrado que el uso de temperaturas más altas permite reducir los tiempos de análisis y mejorar la reproducibilidad. Sin embargo, en otros casos, es interesante trabajar a una temperatura por debajo de la temperatura ambiente, especialmente cuando se quiere separar un gran número de analitos y la resolución entre picos no es suficientemente buena. Éste es el caso de la separación de once fotoiniciadores, en la que bajando la temperatura de la columna hasta 5°C se consiguió un aumento importante en la resolución entre picos, manteniendo aún un tiempo de análisis corto, de tan solo 7 min (Mudiam y col., 2011).

Cuando se necesita analizar un gran número de muestras se crea la necesidad de realizar análisis en tiempos cada vez más cortos. Las separaciones mediante cromatografía líquida se pueden acelerar aumentando el flujo de fase móvil, disminuyendo el tamaño de columna o reduciendo el tamaño de partícula de la columna. Para dar respuesta a esta necesidad, se han desarrollado columnas con mayor eficacia, columnas de ultra-alta eficacia (UHPLC), las cuales están formadas por partículas con un diámetro inferior a los 2 μm (Núñez y col., 2012). La reducción del tamaño de partícula permite acelerar el análisis hasta 9 veces manteniendo la misma eficacia que se obtendría con una columna de LC convencional, o mejorar la eficacia hasta 3 veces manteniendo los mismos tiempos de análisis. Así, por ejemplo, se ha conseguido analizar BPA y sus derivados clorados presentes en leche humana en menos de 5 min (Cariot y col., 2012), BADGE y BFDGE en leche infantil en menos de 7 min (Cao y col., 2009), BPA en yogurt, nata y leche en menos de 7 min

(Sajiki y col., 2007) y nueve ftalatos en leche embotellada en menos de 10 min (Li y col., 2011).

Por otro lado, en ocasiones, ocurre que la resolución completa de todos los analitos de interés no es posible utilizando un único método cromatográfico. Sin embargo, la separación sí es posible cuando se combinan dos métodos cromatográficos ortogonales basados en mecanismos de separación diferentes. Hablamos entonces de cromatografía líquida en dos dimensiones (2-LC). Esta estrategia se ha utilizado, por ejemplo, para la separación de metabolitos de ftalatos presentes en leche (Schlumpf y col., 2010).

Entre los detectores clásicos empleados en las separaciones por LC encontramos el detector ultravioleta (UV), el detector de fluorescencia y el detector electroquímico (ED). En el caso de la detección UV se han empleado de forma habitual las longitudes de onda de 225-278 nm para BPA (Szymanski y col., 2006; Ji y col., 2009; Zhan y col., 2012) y 184-310 nm para fotoiniciadores (Sagrati y col., 2008). El detector de fluorescencia se ha empleado principalmente para el análisis de BPA (Sun y col., 2004; Cao y col., 2009; Farajzadeh y col., 2012), ya que éste muestra fluorescencia nativa con longitudes de onda de excitación y emisión de 275 y 305 nm, respectivamente. La identificación de los analitos cuando se utilizan estos detectores se realiza por comparación de tiempos de retención, por lo que la interferencia de otros compuestos similares debe ser tenida en cuenta, ya que puede dar lugar a falsos positivos. La detección electroquímica es posible cuando estamos analizando moléculas con electroactividad, como aquellas que contienen grupos fenoles. La LC-ED se ha aplicado al análisis de BPA en leche, yogurt y nata (Sajiki y col., 2007).

En el caso de LC acoplada a MS, la fuente de ionización por excelencia es la ionización por electroespray (ESI), variando la polaridad en función del tipo de iones a determinar. Así, se ha utilizado ESI en modo negativo para el análisis de metabolitos de ftalatos, BPA y parabenos, mientras que se ha utilizado ESI en modo positivo para el análisis de ftalatos y fotoiniciadores. Sin embargo, en algunos casos, esta fuente de ionización da resultados muy pobres, como en el caso del fotoiniciador benzofenona (Sagrati y col., 2008). En este caso, el uso de una fuente de fotoionización a presión atmosférica (APPI) permitió un aumento de la señal de hasta tres veces en comparación con la ionización por ESI, además de una mejor definición del pico. Muchos métodos de MS incluyen la adición de patrones internos para corregir las pérdidas durante la preparación de muestra y los efectos de matriz.

Cromatografía de gases (GC)

Entre las columnas de GC más empleadas se encuentran las capilares de sílice fundida recubierta con 5% fenil-polisiloxano y 95% de metil-polisiloxano, con una longitud de 20-30 m, tanto para la separación de ftalatos (Fromme y col., 2011; Miclean y col., 2012) y sus metabolitos (Casajuana y Lacorte, 2004; Feng y col., 2005; Farajzadeh y col., 2012), como de BPA (Goodson y col., 2002; Casajuana y Lacorte, 2004; Cao y col., 2008; Mudiam y col., 2011; Feshin y col., 2012; Gyllenhammar y col., 2012) y fotoiniciadores (Gil-Vergara y col., 2007; Sagratini y col., 2008). También se han utilizado columnas algo más apolares, 100% metilpolisiloxano, para la separación de seis metabolitos de ftalatos en leche embotellada (Yan y col., 2011) y de parabenos en quesos y yogures (De Luca y col., 1995). En GC, las muestras generalmente se inyectan a temperaturas comprendidas entre los 220 y los 300°C. Los programas de temperatura del horno varían en función de la complejidad de las muestras y el número de analitos monitorizados. En el campo de la GC, el mayor avance en los últimos años ha sido la introducción de la GC multidimensional con la técnica de *heart-cutting*, la cual permite aumentar sustancialmente la capacidad de pico, el poder de separación de compuestos traza en matrices complejas, la fiabilidad y la robustez. Esta técnica utiliza un sistema Deans, que es un conmutador en forma de "T" que funciona por cambios de presión y que permite transferir fracciones eluidas de una primera columna según su tiempo de retención, a una segunda columna conectada al detector de MS. Esta estrategia se ha empleado, por ejemplo, para la separación de BPA y BPB en fórmulas infantiles (Cunha y col., 2011).

A pesar de que la MS se ha convertido en el método de detección por excelencia, se encuentran ejemplos con otros detectores como el de ionización de llama (FID) (Yan y col., 2011; Farajzadeh y col., 2012). Cuando se ha utilizado la GC acoplada a un detector de MS para el análisis de estos contaminantes, la fuente de ionización más empleada ha sido la de impacto electrónico (EI). En algunos casos, como ya se ha comentado anteriormente, el análisis de los analitos menos volátiles requiere un paso de derivatización para mejorar su separación y detección. Gracias a este paso se obtienen picos más estrechos y, consecuentemente, una mejor separación del resto de analitos y componentes de la matriz, obteniendo además una mayor sensibilidad.

PROBLEMÁTICA DE LOS BLANCOS DEL PROCEDIMIENTO

Probablemente, una de las mayores complicaciones que presenta el análisis de contaminantes procedentes del envasado y de la conservación de alimentos son los elevados niveles de contaminación que aparecen en los blancos del procedimiento experimental (Fankhauser-Noti y Grob, 2007). Algunos de estos compuestos, especialmente ftalatos y BPA, son contaminantes ubicuos, que están presentes en numerosos productos de laboratorio que se emplean en la preparación de muestra y en la determinación instrumental, incluyendo disolventes orgánicos, rellenos para extracción en fase sólida (SPE), consumibles de plástico, material de vidrio, etc., además de en el aire y el polvo del laboratorio. Por ello, los primeros pasos que se deben dar en el laboratorio cuando se pretende llevar a cabo un análisis de estos contaminantes es la eliminación o reducción de los niveles de fondo de los blancos del procedimiento analítico. Para reducir la presencia de estos contaminantes en los blancos del procedimiento se han propuesto diferentes estrategias: evitar el uso de material plástico, lavar todo el material de vidrio con diferentes disolventes (solución jabonosa, agua Milli-Q caliente, disolventes orgánicos como metanol, acetonitrilo, acetona, diclorometano o hexano), muflar a temperaturas de entre 100 y 450°C entre unas pocas horas y toda la noche tanto el material de vidrio como los rellenos de SPE, introducir óxido de aluminio en las botellas de disolventes, minimizar el tiempo de preparación de muestra y verificar los niveles de contaminación de los disolventes para evitar aquellos con mayores niveles (Ye y col., 2008; Fromme y col., 2011; Li y col., 2011; Feshin y col., 2012; Khedr, 2013). También se ha propuesto el uso de guantes de nitrilo libres de ftalatos en lugar de guantes de látex o de vinilo (Högberg y col., 2008). En cualquier caso, y aun siguiendo todas estas prácticas, de forma habitual se analizan uno o dos blancos junto a las muestras (Högberg y col., 2008), los resultados de concentración de los blancos son promediados y el valor obtenido se resta a los valores de los analitos detectados en las muestras.

CONCLUSIONES

En el contexto de la seguridad alimentaria, el estudio de la contaminación de los alimentos por compuestos tóxicos procedentes del envasado y conservación de alimentos es de gran importancia para la sociedad. Debido a que los alimentos y, especialmente, los productos lácteos son la mayor fuente de exposición del hombre a este tipo de contaminantes, son crecientes los esfuerzos que se

están realizando para monitorizar los niveles de estos compuestos en los alimentos consumidos de forma habitual por la población con el fin de poder establecer los niveles de fondo que existen de estos contaminantes en los alimentos de consumo humano y poder así regularlos en el futuro si fuese necesario. Para poder llevar a cabo esta monitorización se necesitan métodos de análisis lo suficientemente sensibles, precisos, rápidos, robustos y sencillos. En este sentido, la tendencia actual se centra en buscar técnicas que respeten el medio ambiente, tanto en los métodos de tratamiento de muestra como en la determinación instrumental, que usen menores cantidades de disolventes y también volúmenes de muestra más pequeños, como la SPE o la PLE en el caso de los métodos de tratamiento de muestra o la UHPLC en el caso de los métodos de determinación instrumental.

REFERENCIAS.

- Alexiadou, D. K., Maragou, N.C., Thomaidis, N. S., Theodoridis, G. A., Koupparis, M. A. *J. Sep. Sci.* (2008), 31, 2272-2282.
- Bagnati, R., Bianchi, G., Marangon, E., Zuccato, E., Fanelli, R., Davoli, E. *Rapid Comm. Mass Spectrom.* (2007), 21, 1998-2002.
- Ballesteros-Gómez, A., Rubio, S., Pérez-Bendito, D. *J. Chromatogr. A* (2009), 1216, 449-469.
- Benson, B. *Regul. Toxicol. Pharmacol.* (2009), 53, 90-101.
- Blount, B.C., Milgram, K.E., Silva, M.J., Malek, N.A., Reidy, J.A., Needham, L.L., Brock, J.W. *Anal. Chem.* (2000), 72, 4127-4134.
- Bradley, E.L., Castle, L. "Residues of Food Contact Materials" en *Handbook of Dairy Food Analysis* (Nollet, L. and Toldrá, F.) Taylor & Francis, Boca Ratón, FL, EEUU. (2010), p. 755.
- Calafat, A.M., Slakman, A.R., Silva, M.J., Herbert, A.R., Needham, L. L. *J. Chromatogr. B Analyt. Technol. Biomed. Life Sci.* (2004), 805, 49-56.
- Cao X.L., Dufresne, G., Belisle, S., Clement, G., Falicki, M., Beraldin, F., Rulibikiye, A. *J. Agric. Food Chem.* (2008), 56, 7919-7924.
- Cao, X.L., Dufresne, G., Clement, G., Bélisle, S., Robichaud, A., Beraldin, G. *J. AOAC Int.* (2009), 92, 1780-1789.
- Cao, S., Liu, Z., Zhang, L., Xi, C., Li, X., Wang, G., Yuan, R., Mu, Z. *Anal. Meth.* (2013), 5, 1016-1023.
- Cariot, A., Dupuis, A., Albouy-Llaty, M., Legube, B., Rabouan, S., Migeot V. *Talanta* (2012), 100, 175-182.
- Casajuana, N., Lacorte, S. *J. Agric. Food Chem.* (2004), 52, 3702-3707.
- Cunha, S.C., Almeida, C., Mendes, E., Fernandes, J.O. *Food Add. Contam.* (2011), 28, 513-526.
- De Luca, C., Passi, S., Quattrucci, E. *Food Add. Contam.* (1995), 12, 1-7.
- EC (2002). Commission directive 2002/72/EC of 6 August 2002 relating to plastic materials and articles intended to come into contact with foodstuffs. *OJEC*, L220, 18-58.
- EC (2006). Commission directive 2006/22/EC of 22 December 2006 on good manufacturing practice for materials and articles intended to come into contact with food. *OJEC*, L384/75.
- EC (2007). Commission Directive 2007/19/EC of 30th March 2007 amending Directive 2002/72/EC relating to plastics materials and articles to come into contact with food and Council Directive 85/572/EEC laying down the list of simulants to be used for testing migration of constituents of plastic materials and articles intended to come into contact with foodstuffs. *OJEC*, L91.
- EFSA (2010). Scientific Opinion on Bisphenol A: evaluation of a study investigating its neurodevelopmental toxicity, review of recent scientific literature on its toxicity and advice on the Danish risk assessment of Bisphenol a. *The EFSA Journal*, 8, 1829.
- Fankhauser-Noti, A., Grob, K. *Anal. Chim. Acta* (2007), 582, 353-360.
- Feng, Y.L., Zhu, J., Sensenstein, R. *Anal. Chim. Acta* (2005), 538, 41-48.
- Farajzadeh, M. A., Djozan, D., Mogaddam M. R. A., Norouzi, J. (2012), *J. Sep. Sci.* 35, 742-749.
- Ferrer, E., Santoni, E., Vittori, S., Font, G., Manes, J., Sagratini, G. *Anal. Meth.* (2011), 126, 360-367.
- Feshin, D.B., Fimushkin, P.V., Brodskii, A.A., Shelepchikov, E., Mir-Kadyrova, E.Y., Kalinkevich, G.A. *J. Anal. Chem.* (2012), 67, 517-523.
- Fromme, H., Gruber, L., Secking, E., Raab, U., Zimmermann, S., Kiranoglu, M., Schlummer, M., Schwegler, U., Smolic, S., Völkel, W. *Environ. Int.* (2011), 3, 715-722.
- Gallart-Ayala, H., Núñez, O., Moyano, E., Galceran, M. T. *J. Chromatogr. A* (2011), 1218, 459-466.
- Gil-Vergara, A., Blasco, C., Picó, Y. *Anal. Bioanal. Chem.* (2007), 389, 605-617.
- Goodson, A., Summerfield, W., Cooper, I. *Food Add. Contam.* (2002), 19, 796-802.
- Grob, K., Biedermann, M., Scherbaum, E., Roth, M., Riege, K. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* (2006), 46, 529-535.
- Guerranti, C., Sbordoni, I., Fanello, L., Borghini, F., Corsi, I., Focardi, E. *Micorchem. J.* (2013), 107, 178-181.
- Gyllenhammar, I., Glynn, A., Darnerud, P.O., Lignell, S., van Delft, R., Aune, M. *Environ. Int.* (2012), 43, 21-28.

- Hines, E.P., Calafat, A.M., Silva, M.J., Mendola, P., Fenton, S.E. *Environ. Health Perspect.* (2009), 117, 86-92.
- Högberg, J., Hanberg, A., Berglund, M., Skerfving, S., Remberger, M., Calafat, A.M., Filipsson A.F., Jansson, B., Johansson, N., Appelgren, M., Hakansson, H. *Environ. Health Perspect.* (2008), 116, 334-339.
- JECFA (2007). Sixty-seventh report of the joint FAO/WHO Expert committee of Food Additives. Evaluation of certain food additives and contaminants. WHO technical report series 940. World Health Organization, Geneva.
- Ji, Y., Yin, J., Xu, Z., Zhao, C., Huang, H., Zhang, H., Wang, C. *Anal. Bioanal. Chem.* (2009), 395, 1125-1133.
- Khedr, A. *J. Chromatogr. B* (2013), 930, 98-103.
- Knapp, D.R. Handbook of analytical derivatisation reactions. Wiley, New York (1979).
- Kuroto-Niwa, R., Tateoka, U., Usuky, Y., Nozawa, R. *Chemosphere* (2007), 66, 1160-1164.
- Latini, G., Del Vecchio, A., Massaro, M., Verrotti, A., De Felice, C. *Toxicology* (2006), 226, 90-98.
- Li, Z., Xue, G., Xu, L., Peng, C., Kuang, H., Ding, T., Xu, C., Sheng, C., Gong, Y., Wang, L. *J. Chromatogr. Sci.* (2011), 49, 338-343.
- Liu, X., Ji, Y., Zhang, H., Liu, M. *Food Add. Contam.* (2008), 25, 772-778.
- Malone, E.M., Elliott, C.T., Kennedy, D.G., Regan, L. *J. Chromatogr. B* (2010), 878, 1077-1084.
- Maragou, N.C., Lampi, E.N., Thomaidis, N.S., Koupparis, M.A. *J. Chromatogr. A* (2006), 1129, 165-173.
- Miclean, M., Cadar, O., Roman, C. *Studia Ubb Chem.* (2012), 57, 127-133.
- Molina-García, L., Fernández-de Córdova, M.L., Ruiz-Medina, A. *Talanta* (2012), 96, 195-201.
- Mortensen, G.K., Main, K.M., Andersson, A.M., Leffers, H., Skakkebaek, N.E. *Anal. Bioanal. Chem.* (2005), 382, 1084-1092.
- Mudiam, M.K.R., Jain, R., Dua, V.K., Singh, A.K., Sharma, V.P., Murthy, R.C. *Anal. Bioanal. Chem.* (2011), 401, 1695-1701.
- Núñez, O., Gallart-Ayala, H., Martins, C.P.B., Lucci, P. *J. Chromatogr. A* (2012), 1228, 298-323.
- Ridgway, K., Lalljie, S.P.D., Smith, R.M. *J. Chromatogr. A* (2007), 1153, 36-53.
- Sagratini, G., Caprioli, G., Cristialli, G., Giardin, D., Riccuitelli, M., Volpini, R., Zuo, Y., Vittori, S. *J. Chromatogr. A* (2008), 1194, 213-220.
- Sajiki, J., Miyamoto, F., Fukata, H., Mori, C., Yonekubo, J., Hayakawa, K. *Food Add. Contam.* (2007), 24, 103-112.
- Salafraña, J., Batlle, R., Nerín, C. *J. Chromatogr. A* (1999), 864, 137-144.
- Schlumpf, M., Kypke, K., Wittassek, M., Angerer, J., Mascher, H., Mascher, D., Vökt, C., Birchler, M., Lichtenstiger, W. *Chemosphere* (2010), 81, 1171-1183.
- Shao, B., Tu, H.H.X., Huang, L. *J. Chromatogr. B* (2007), 850, 412-516.
- Sharman, M., Read, W.A., Castle, L., Gilbert, J. *Food Add. Contam.* (1994), 11, 375-385.
- Shen, D. X., Lian, H. Z., Ding, T., Xu, J. Z., Shen, C. Y. *Anal. Bioanal. Chem.* (2009), 395, 2359-2370.
- Sorensen, L.K. *Rapid. Comm. Mass Spectrom.* (2006), 20, 1135-1143.
- Sun, Y., Irie, M., Kishikawa, N., Wada, M., Koruda, N., Nakashima, K. *Biomed. Chromatogr.* (2004), 18, 501-507.
- Szymanski, A., Rykowska, I., Wasiak, W. *Acta Chromatogr.* (2006), 17, 161-172.
- Vicent, Y., Xiaoyung, Y., Calafat, A.M. *Trends Anal. Chem.* (2012), 38, 129-142.
- Vom Saal, F.S., Hughes, C. *Environ. Health Perspect.* (2005), 113, 926-933.
- Wams, T. *J. Sci. Total Environ.* (1987), 66, 1-16.
- Wetherill, Y. B., Petre, C. E., Monk, K.R., Puga, A., Knudsen, K. E. *Mol. Cancer Ther.* (2002), 1, 515-524.
- Yan, W., Li, Y., Zhao, L., Lin, J. M. *J. Chromatogr. A* (2009), 1216, 7539-7545.
- Yan, H., Cheng, X., Liu, B. *J. Chromatogr. B* (2011), 879, 2507-2512.
- Ye, X., Kuklennyik, Z., Needham, L. L., Calafat, A. M. *J. Chromatogr. B* (2006), 831, 110-115.
- Ye, X., Bishop, A. M., Needham, L. L., Calafat, A. M. *Anal. Chim. Acta* (2008), 622, 150-156.
- Ye, X., Zhou, X., Hennings, R., Kramer, J., Calafat, A. M. *Environ. Health Perspect.* (2013), 121, 283-286.
- Yusa, V., Ye, X., Calafat, A. M. *Trends Anal. Chem.* (2012), 38, 129-142.
- Zhan, W., Wei, F., Xu, G., Cai, Z., Du, S., Zhou X., Li, F., Hu, Q. *J. Sep. Sci.* (2012). 35, 1036-1043.

NOTICIAS DE LA SECyTA

XIII REUNIÓN CIENTÍFICA DE LA SECyTA (42ª REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

La XIII Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (42ª Reunión del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines) se celebró del **8 al 11 de octubre de 2013** en el Hotel Beatriz Atlantis & Spa del Puerto de la Cruz, Tenerife y estuvo conectada con el 20th International Symposium on Electro- and Liquid Phase-Separation Techniques (ITP2013) que se celebró en el mismo lugar entre el 6 y el 9 de octubre de 2013. La reunión de la SECyTA fue organizada por La Universidad de La Laguna (ULL) y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), siendo **Miguel Ángel Rodríguez** y **Alejandro Cifuentes** el chairman y co-chairman del evento y **Javier Hernández** el coordinador del Comité Organizador.

En este evento se presentaron los últimos desarrollos en técnicas analíticas de separación cromatográficas y afines, incluyendo desarrollos teóricos e instrumentales, acoplamientos, técnicas ómicas así como nuevos tratamientos de muestra y sus aplicaciones para el análisis clínico, farmacéutico, medioambiental y de alimentos, entre otras.

El congreso contó con 150 participantes (ver fotografía), de los cuales 40 fueron estudiantes a los que se les concedió ayuda para su asistencia, fomentando así la formación científica de los más jóvenes.

Para empezar el congreso con buen pie, el primer día tuvo lugar una atractiva excursión al Parque Nacional de las Cañadas del Teide, seguida por un cóctel de bienvenida amenizado con bailes canarios.

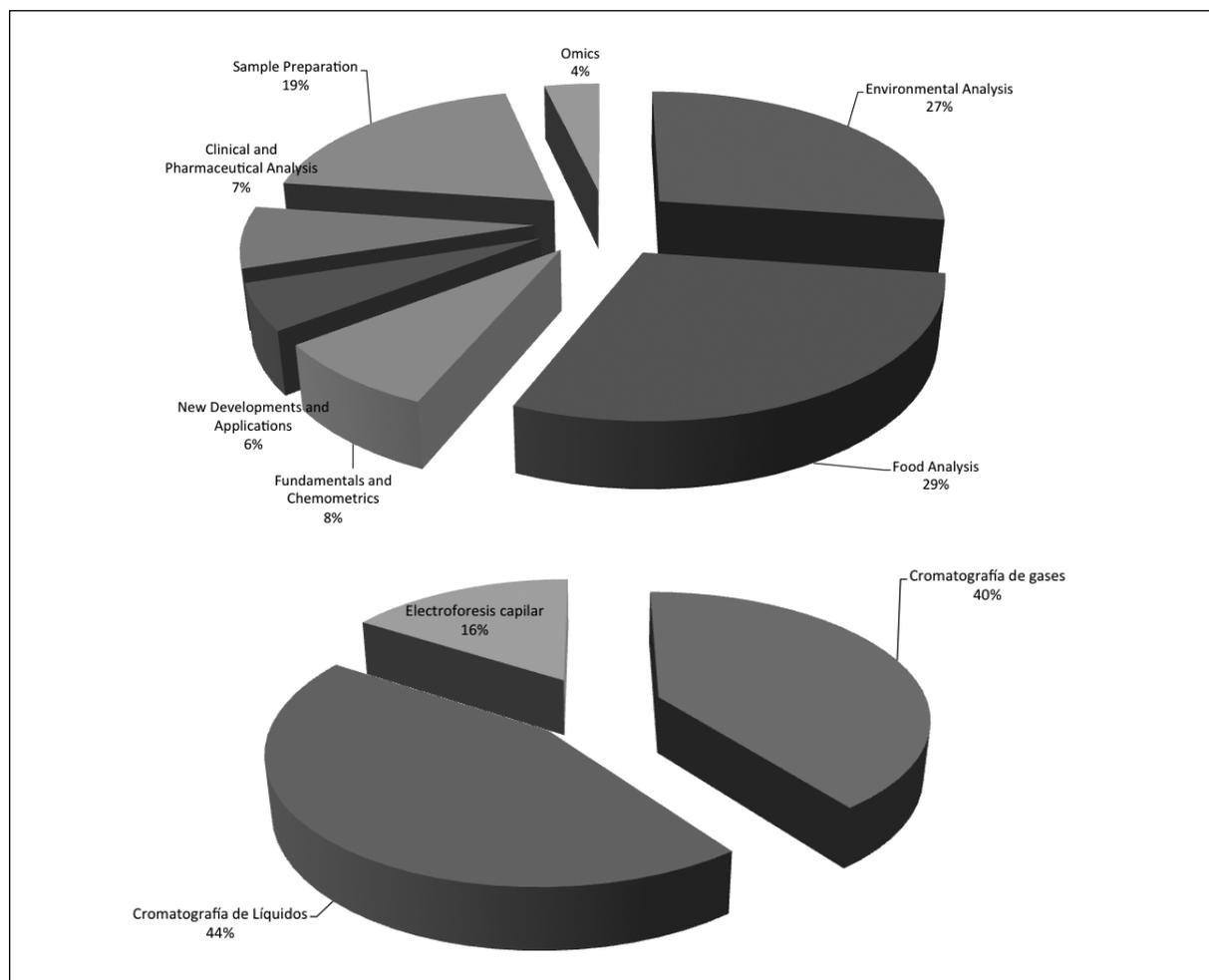
El programa científico contó con 48 comunicaciones orales y 110 comunicaciones en formato de cartel. Entre las comunicaciones orales son de destacar las 4 conferencias plenarias impartidas por destacados científicos españoles y extranjeros:

- “Population-based Omics” **Jonas Bergquist**, Uppsala University, Uppsala, Sweden.
- “Green Foodomics”, **Elena Ibáñez**, Institute of Food Science Research-CIAL (CSIC), Madrid, Spain.
- “Dissecting an untargeted metabolomic workflow” **Oscar Yanes**, Spanish Biomedical Research Centre in Diabetes and Associated Metabolic Disorders CIBERDEM, Barcelona, Spain y Rovira I Virgili University, Tarragona, Spain.
- “Chemometrics and chromatography: Fear and wonder”, **Jesús Sanz**, Institute of General Organic Chemistry-IQOG (CSIC), Madrid, Spain.

Asimismo, las conferencias impartidas por científicos jóvenes se agruparon en dos sesiones plenarias que resultaron de gran interés para todos los asistentes.

En cuanto a las comunicaciones formato cartel, los campos donde hubo una mayor participación fueron Ciencia y Tecnología de Alimentos y Análisis Ambiental, mientras que el liderazgo de la técnica más empleada estuvo reñido entre la Cromatografía de Líquidos (44 %) y la de Gases (40 %), como se puede apreciar en las figuras adjuntas preparadas por el Comité Organizador.





La XIII Asamblea General de la SECyTA se celebró el día 10 por la tarde, donde tuvieron lugar las elecciones para la renovación de la Junta de Gobierno de nuestra Sociedad y la concesión de becas y ayudas para la participación de estudiantes y jóvenes investigadores en este evento.

El congreso se acompañó de una exposición instrumental y algunas conferencias orales por parte de las casas comerciales especializadas como Agilent, Bruker, Leco, Micron, Perkin Elmer, Thermo y Waters, donde se presentaron las últimas novedades y avances científicos en instrumentación analítica.

Durante la ceremonia de clausura de la reunión, el día 11 de octubre se hizo entrega de los IX Premios “José Antonio García Domínguez” patrocinados por Bruker Chemical Analysis a las comunicaciones orales y carteles más destacados a juicio del jurado constituido

a tal efecto y del accésit del premio “Club de usuarios de SPME” otorgado por la empresa Sigma Aldrich.

Aunque es difícil transcribir con palabras lo que para todos los asistentes supuso un entrañable y divertido momento, me gustaría haceros a todos los socios conocedores de la magnífica presentación que nos tenía preparada el Comité Organizador con fotografías de los momentos más destacados de los ya 13 años que han pasado desde que nuestra Sociedad se constituyera bajo el nombre de SECyTA. La alta calidad de los trabajos, la gran participación de estudiantes, la estupenda labor del Comité Organizador y el intercambio de conocimiento científico entre todos los asistentes en este maravilloso entorno como es el Puerto de la Cruz hicieron sin duda que el congreso fuera todo un éxito.

María Luz Sanz

Instituto de Química Orgánica General (CSIC)

IX EDICIÓN PREMIOS JOSÉ ANTONIO GARCÍA DOMÍNGUEZ

En el marco de la XIII Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (SECyTA) celebrada en Tenerife del 8 al 11 de octubre de 2013 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 IX 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 M^a José González (presidenta), Elena Ibáñez, Rosa M^a Marcé, Yolanda Picó, Jesús Sanz y Javier Santos, 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: YS2-04

Título: ADVANCES IN COUPLING CSEI-SWEEPING-MECK WITH DIFFERENT SAMPLE TREATMENTS FOR 5-NITROIMIDAZOLE DETERMINATION IN FOOD, ENVIRONMENTAL AND CLINICAL MATRICES

Autores:

Maykel Hernández-Mesa, Diego Airado-Rodríguez, Carmen Cruces-Blanco, Ana M. García Campaña
University of Granada, Granada, Spain

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

Comunicación: YS2-02

Título: SELECTIVE SEPARATION OF BIOACTIVE CARBOHYDRATES USING IONIC LIQUIDS

Autores:

Laura Ruiz-Aceituno, Cipriano Carrero-Carralero, Lourdes Ramos, Jesús Sanz, María Luz Sanz
Institute of General Organic Chemistry-IQOG (CSIC), Madrid, Spain

En el caso de los premios a las mejores comunicaciones tipo cartel presentadas en la XIII Reunión Científica de la SECyTA, el jurado, constituido por las personas mencionadas anteriormente, tomó por unanimidad los siguientes acuerdos:

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

Comunicación: PS1-41

Título: MODELLING OF RETENTION AND PEAK SHAPE IN COMPREHENSIVE TWO-DIMENSIONAL LIQUID CHROMATOGRAPHY

Autores:

Cassandra Ortiz-Bolsico¹, José Ramón Torres-Lapasió¹, Sandra Pous-Torres^{1,2}, María Celia García-Álvarez-Coque¹, Gabriel Vivó-Truyols², Peter Schoenmakers²

¹ University of Valencia, Valencia, Spain

² University of Amsterdam, Amsterdam, The Netherlands

2^o Premio al mejor Póster (300 euros)

Comunicación: PS2-15

Título:

SORBENT-PACKED NEEDLE MICROEXTRACTION TRAP FOR MUSK FRAGRANCES DETERMINATION IN ENVIRONMENTAL WATER SAMPLES

Autores:

Laura Vallecillos¹, Eva Pocurull¹, Juan M. Sánchez², Francesc Borrull¹

¹ Rovira i Virgili University, Tarragona, Spain

² University of Girona, Girona, Spain

La entrega de los premios tuvo lugar el 11 de octubre de 2013, durante la ceremonia de clausura de la XIII Reunión Científica de la SECyTA.

Belén Gómara

Secretaria de la SECyTA

1^{er} Premio a la mejor Comunicación Oral (800 euros): comunicación YS2-04

ADVANCES IN COUPLING CSEI-SWEEPING-MEKC WITH DIFFERENT SAMPLE TREATMENTS FOR 5-NITROIMIDAZOLE DETERMINATION IN FOOD, ENVIRONMENTAL AND CLINICAL MATRICES

Maykel Hernández-Mesa, Diego Airado-Rodríguez, Carmen Cruces-Blanco, Ana M. García-Campaña

Cation-selective exhaustive injection (CSEI)-sweeping is a novel methodology initially developed by Quirino and Terabe^[1]. It combines two on-line concentration techniques: field-enhanced sample injection (FESI) with sweeping and it is possible to achieve concentration factors from a thousand- to almost a million-fold in relation to the normal injection in capillary electrophoresis (CE)^[1]. It overcomes the lack of sensitivity that has been traditionally associated to CE-UV methods, being a very useful alternative in trace analysis. In spite of this, few methods have been reported using this new sensitive methodology, which involves the need of more contributions to check its advantages and disadvantages.

In this work, we have developed a new method based on CSEI-sweeping for the analysis of 5-nitroimidazoles (5-NDZs) in different matrices. Prior to injection, the capillary must be rinsed with a low conductivity buffer (50 mM phosphate buffer pH 2.5), followed by a plug of a higher conductivity buffer (100 mM phosphate pH 2.5, 50 mbar, \approx 31.5 % total capillary volume) and a plug of water (50 mbar, 2 s). Analytes, dissolved in a solvent of lower conductivity than that of the separation medium, are electrokinetically injected at 9.8 KV for 632 s in a bare fused-silica capillary (57.2 cm, 50 μ m I.D.), and thus the desired FESI effect is obtained. 5 mM phosphoric acid with 5% of methanol was selected as injection solvent to perform FESI. Separation was carried out applying -30 KV at 20°C in 44 mM phosphate buffer pH 2.5, containing 8 % tetrahydrofurane and 123 mM SDS.

Moreover, the proposed method has been applied in different areas as food, environmental and clinical analyses. Besides, different sample pretreatments have been evaluated to be coupled with CSEI-sweeping: solid phase extraction (SPE) has been proposed for egg sample cleaning-up; dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME) has been used prior to the analysis of water samples; and untreated human urine and serum samples has been also evaluated. Detection limits at low ng/mL have been obtained for egg and water samples, achieving the recommendations from European Community Reference Laboratories^[2]. Detection limits at low μ g/mL have been reached for urine and serum samples, which enables the detection of these drugs at their normal levels in biological fluids^[3].

^[1] J.P. Quirino, S. Terabe, *Anal. Chem.* 72 (2000) 1023-1030.

^[2] CRL Guidance Paper (2007). <http://lfqm302.es/s/k> (accessed on 27 May 2013).

^[3] E.D. Ralph, J.T. Clarke, R.D. Libke, R.P. Luthy, W.M.M. Kirby, *Antimicrob. Agents Chemother.* 6 (1974) 691-696.

1^{er} Premio al mejor Póster (400 euros): comunicación PS1-41

MODELLING OF RETENTION AND PEAK SHAPE IN COMPREHENSIVE TWO-DIMENSIONAL LIQUID CHROMATOGRAPHY

Casandra Ortiz-Bolsico, José Ramón Torres-Lapasió, Sandra Pous-Torres, María Celia García-Álvarez-Coque, Gabriel Vivó-Truyols, Peter Schoenmakers

The interest in developing approaches for separating highly challenging samples, such as biopharmaceuticals, peptide maps, plant extracts, food matrices, polymers, etc. is growing. In this regard, comprehensive two-dimensional liquid chromatography (LC \times LC) offers the possibility of substantially increasing the peak capacity in comparison with conventional LC, by combining orthogonal separations. Contemporary instrumentation provides many new opportunities for changing the mobile phase composition in the second dimension, applying gradients, varying the initial and final compositions of the second-dimension gradient, etc. A recent example of such instrumentation is the Agilent 1290 Infinity 2D-LC solution.

However, method development in LC \times LC is a bottleneck. The ability to reliably predict chromatograms after a few initial runs may help overcome the most important obstacles to the proliferation of LC \times LC. Generic retention models can be generated and validated efficiently using LC \times LC experiments. The resulting models may be used to formulate guidelines and strategies for method development in LC \times LC.

In this work, the separation of a set of polyphenols is studied with RPLC and HILIC, using acetonitrile-water mixtures in the gradient-elution mode. These systems show "orthogonal" (complementary) behavior, while using similar eluents. Gradient times and peak profiles were modeled for both dimensions versus the gradient parameters (initial and final concentration of organic solvent and gradient slope) for HILIC \times RPLC separations. The models were used to predict the retention time of all solutes at any condition, and optimize the gradients. The parameters that affect the gradient modeling (e.g. dwell time, dead volume, sample injection volume and equilibration time) were considered.

13ª ASAMBLEA GENERAL DE LA SECyTA (XLII REUNIÓN CIENTÍFICA DEL GCTA)

La 13ª Asamblea General de la SECyTA, que contó con la asistencia de 87 socios, se celebró el día 10 de octubre de 2013, a las 17:30 h, en la sala Doña Lola del Hotel Beatriz Atlantis & Spa del Puerto de la Cruz, Tenerife (Avenida Venezuela, 15) con el siguiente orden del día:

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

Desarrollo de la sesión y acuerdos adoptados

En primer lugar, la Presidenta da la bienvenida a todos los asistentes y expresa su más sincero agradecimiento a Miguel Ángel Rodríguez Delgado, Alejandro Cifuentes Gallego, Javier Hernández Borges y a los miembros de los Comités Científico y Organizador de la XIII Reunión Científica de la SECyTA por el excelente trabajo realizado.

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

Los miembros de la Junta de Gobierno que cesan en sus cargos de acuerdo con los Estatutos de la Sociedad son: una Vicepresidenta (Yolanda Picó García), 3 vocales (Ana Agüera López, Coral Barbas Arribas y Miguel Ángel Pérez Alonso), y, por renuncia para volver a la alternancia dispuesta por los estatutos, el Tesorero (Jordi Díaz Ferrero). El cese del Tesorero se debe a que según los estatutos, el Presidente y el Secretario deben cesar en el mismo proceso de elecciones junto con uno de los vicepresidentes, mientras que el Tesorero, junto con el otro Vicepresidente, debe cesar de forma alterna con los anteriores.

En la última Reunión de la Junta de Gobierno de la SECyTA celebrada el pasado 31 de enero de 2013 en

Madrid se acordó el siguiente calendario para proceder a renovar los cargos señalados:

- 1 de julio de 2013: comunicación por carta a los socios de la convocatoria de elecciones e inicio del período de presentación de candidaturas.
- 6 de septiembre de 2013: fecha límite de presentación de candidaturas.
- 16 de septiembre de 2013: comunicación a la Presidenta y a los miembros de la Junta de Gobierno de los candidatos presentados.
- 17 de septiembre de 2013, comunicación por carta a los socios de la SECyTA de los candidatos presentados y de la normativa para emitir el voto por correo. Inicio del periodo de votación por correo.
- 7 de octubre de 2013: fecha límite de aceptación de votos por correo.
- 10 de octubre: votación en la 13ª Asamblea General de la SECyTA.

Transcurrido los plazos establecidos, los miembros de la SECyTA que han presentado su candidatura a estas elecciones 2013 son los siguientes:

Vicepresidenta: Yolanda Pico García (Universidad de Valencia)
 Tesorero: Jordi Díaz Ferrero (Instituto Químico de Sarriá, Universitat Ramon Llull, Barcelona)
 4 Vocales: Ana María García Campaña (Universidad de Granada)
 Miguel Ángel Pérez Alonso (Bruker Española)
 Juan Vicente Sancho Llopis (Universidad de Castellón)
 Javier Rodríguez Serrano (Thermo Scientific)

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

Una vez comunicado a los asistentes de la asamblea los nombres de los candidatos presentados, se procede a la constitución de la Mesa Electoral, de acuerdo con la normativa de elecciones aprobada en Junta de Gobierno de 5 de julio de 2007, y que establece que la Mesa estará formada por el socio más antiguo

y el más moderno que se encuentre presente en la Asamblea. La Mesa Electoral queda constituida por el Dr. Jesús Sanz Perucha (nº socio 51) y Dña. Patricia Freixas Adarve (nº socia 1720), quienes se encargarán de presidir la votación. Para agilizar el proceso de votación, se facilitó a los socios asistentes a la Asamblea papeletas con el nombre de los candidatos para poder emitir el voto. La Secretaria entrega a la Mesa Electoral el Censo de Socios, el Acta de Votación y los votos recibidos por correo y/o entregados personalmente a la Secretaria, de acuerdo con la normativa establecida en la convocatoria de elecciones. Con el fin de no alargar innecesariamente la Asamblea, se tratan el resto de puntos del Orden del día mientras se procede a la votación de los asistentes.

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

La Presidenta indica a los asistentes que el acta de la 12ª Asamblea General de la SECyTA está colgada en la página web de la SECyTA desde diciembre de 2012, por lo que ha habido tiempo suficiente para que la lean todos los socios. De hecho se han recibido algunas modificaciones por parte de algunos socios. En este momento la Presidenta pregunta si alguno de los asistentes quiere hacer alguna modificación al acta o si algún socio quiere que se lea el acta en su totalidad. Al no haber ninguna intervención por parte de los socios presentes, se procede a aprobar el acta y se pasa al punto siguiente.

2. Informe de la Presidenta.

2.1. Celebración de las 14^{as} Jornadas de Análisis Instrumental (JAI 2014).

La Presidenta informa de que en la edición de las JAI de 2014, la responsabilidad máxima de la organización del programa científico de las Jornadas recae en la SECyTA, que va a liderar y gestionar los aspectos científicos y de organización de las Jornadas. Por su parte, la SEQA va a colaborar en todos aquellos temas en los que se solicite su ayuda consensuando los diversos aspectos del contenido del programa científico, la gestión de becas y otros temas de organización de las Jornadas.

La Presidenta remarca 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 día de hoy, los datos más importantes que ya están fijados para la celebración de las JAI son los siguientes:

- Fechas: entre 1 y el 3 de octubre 2014.
- Sede: Recinto Gran Vía de Fira de Barcelona, en los mismos pabellones donde se celebrará Expoquimia.
- Secretaría técnica: todavía se está gestionando.
- Cuotas: el precio de la inscripción para los socios de la SECyTA y el resto de Sociedades participantes en las JAI será de 395 € (incluyendo comidas, cafés, documentación, etc.) y el precio para los estudiantes será de 180 €.
- Fechas clave: Fecha límite de envío de comunicaciones: 30 de mayo de 2014
Fecha límite para inscripciones reducidas: 15 de agosto de 2014
- El programa científico del congreso 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.

2.2. Cierre de la XII Reunión Científica de la SECyTA (Tarragona 2012).

La Presidenta informa del cierre de la XII Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas Afines (XLI Reunión del Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines) que se celebró del 14 al 16 de noviembre de 2012 en el Palau de Fires i Congressos de Tarragona. Esta reunión fue organizada por la Universidad Rovira i Virgili de Tarragona, siendo Rosa M^a Marcé Recasens la Presidenta del Comité Organizador. La valoración de la Reunión ha sido muy positiva, tanto desde un punto de vista de participación, más de 200 asistentes, como por el excelente nivel científico de las comunicaciones presentadas. El programa científico contó con 3 conferencias plenarios, 4 conferencias invitadas, 38 comunicaciones orales, 140 comunicaciones en formato de cartel, 2 sesiones de discusión de los carteles más interesantes, 5

seminarios comerciales, 1 mesa redonda sobre el papel de la cromatografía en la industria y, además, la XII Asamblea General de la SECyTA, que se celebró el día 15 por la tarde. 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 (54 becas y ayudas de viaje concedidas a estudiantes que presentaron trabajos de investigación) 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 discurrejera con gran agilidad. Sin duda, un éxito.

La XII Reunión Científica contó también con una exposición comercial en la que participaron varias de las empresas más punteras en el sector de la instrumentación analítica, algunas patrocinando alguna ponencia, como Agilent, Micrón, Scharlab, Thermo, Waters, Leco, Perkin Elmer y Vertex. No cabe duda de que la Reunión fue 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 XII Reunión, el día 16 de noviembre, se hizo entrega de los IX Premios José Antonio García Domínguez patrocinados por Bruker 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 cumplía la séptima edición.

En paralelo se desarrolló 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.

2.3. XIII Reunión Científica de la SECyTA (42ª del GCTA) (Tenerife 2013).

La Presidenta informa sobre el desarrollo de la Reunión actual. Ha habido un elevado número de asistentes (en total 150 congresistas). La participación de conferenciantes de primer nivel, tanto en las conferencias plenarias como las invitadas ha sido muy satisfactoria. Las conferencias plenarias impartidas por investigadores de gran prestigio internacional como el profesor Jonas Bergquist de la Universidad de Upsala, la Dra. Elena Ibáñez del CIAL-CSIC, el Dr. Óscar Yanes de la Universidad Rovira i Virgili y del CIBERDEM y el Dr. Jesús Sanz del IQOG-CSIC, nos han presentado (o van a presentar mañana) temas tan interesantes como las técnicas ómicas aplicadas a estudios de poblaciones, la "Green Foodomics" o la quimiometría aplicada a la cromatografía.

También destacar la elevada calidad de las comunicaciones presentadas. En total se han recibido 158 comunicaciones, de las cuales 48 fueron seleccionadas como orales y 110 en forma de cartel. Asimismo, destacar la concesión de 40 becas de inscripción y 38 ayudas de viaje para facilitar la asistencia al congreso a los jóvenes investigadores.

Resaltar la gran cantidad de jóvenes investigadores que han participado en el congreso, más del 30% del total de asistentes, lo cual es importante por ser ellos los que van a dar continuidad no solo a la Sociedad sino a las investigaciones sobre el campo de las técnicas de separación.

Por último, la Presidenta comenta a los asistentes que para enviar un artículo a publicar en la revista *Journal of Chromatography A* hay que utilizar la reseña de este congreso (Spanish Society 2013).

2.4. Información sobre el Boletín.

La Presidenta informa de que finalmente no se cambió la imprenta con la que se trabajaba ya que dicha imprenta (Helios) ha reducido considerablemente los costes por el mismo servicio. Los editores y responsables del Boletín han hecho un gran trabajo, consiguiendo lo que parecía imposible. La Presidenta opina que ésta es una buena noticia, ya que el que los socios reciban el Boletín dos veces al año es muy importante para mantener viva la actividad científica de la Sociedad y la inter-relación de las empresas con

los socios de la SECyTA. Asimismo, la Presidenta informa de que si alguien tiene alguna pregunta sobre el tema, la Dra. M^a Luz Sanz (editora del Boletín), que está en la sala, la contestará encantada.

2.5. IX Edición de los Premios José Antonio García Domínguez.

La Presidenta informa de que la IX 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 de los carteles para las comunicaciones que desean optar a este premio. Esta vez se ha pedido en el momento de la inscripción que se señalara en la casilla correspondiente si se quería optar al premio. Esto se ha hecho para 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 que no quedara ningún premio desierto, ya que en ediciones anteriores el número de comunicaciones que cumplían estos requisitos era realmente escaso. 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 mismos se realizará el viernes 11 de noviembre durante la ceremonia de clausura del congreso.

3. Informe de la Secretaria.

En su informe, la Secretaria trató los siguientes temas.

3.1. Socios de la SECyTA.

La Secretaria de la SECyTA, Dra. Belén Gómara, informa que desde la última Asamblea General, celebrada el 15 de noviembre de 2012 en Tarragona, hasta hoy, 10 de octubre de 2013, se han recibido un total de 31 altas y 77 bajas. En el listado actual de Secretaría el número de socios a día de la celebración de esta Asamblea es de 518 socios.

El número de altas se mantiene en la media de los últimos años y de las 77 bajas, 6 corresponden a jubilaciones, 7 a bajas estatutarias (como consecuencia de tres impagos consecutivos) y 7 a bajas realizadas desde Secretaría/Tesorería al tratarse de socios de los que no se disponía de número de cuenta y con los que se intentó contactar sin éxito por todos los medios dis-

ponibles. El resto de bajas (57) engloban las bajas anuales habituales (27, de las cuales 7 son altas realizadas en 2012), las bajas derivadas de la solicitud de actualización de datos por carta, e-mail o teléfono (20), las bajas derivadas de la devolución y reclamación de recibos (7) y las bajas causadas por otros motivos (3).

3.2. Ayudas concedidas por la SECyTA.

Se han concedido un total de 11 ayudas (de 500 € cada una) para la asistencia a congresos internacionales, distribuidos de la siguiente forma:

- 1 ayuda para la asistencia al 29th International Symposium on MicroScale Bioseparations (MSB 2013) celebrado en Charlottesville, VA, USA del 10 al 14 de mayo de 2013.
- 6 ayudas para la asistencia al 39th International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques (HPLC 2013) celebrado en Ámsterdam (Holanda) del 16 al 20 de junio de 2013.
- 2 ayudas para la asistencia al 17th European Conference on Analytical Chemistry (Euroanalysis 2013) celebrado en Varsovia (Polonia) del 25 al 29 de agosto de 2013.
- 2 ayudas para la asistencia al 20th International Symposium on Electro- and Liquid Phase-Separation Techniques (ITP 2013) celebrado en Tenerife (España) del 6 al 9 de octubre de 2013.

Asimismo, se concedieron 2 ayudas para un congreso nacional patrocinado por la SECyTA, la IV Reunión Nacional de Dioxinas, Furanos y Compuestos Orgánicos Persistentes Relacionados, celebrada en Alicante del 26 al 28 de junio de 2013.

En el caso de la XIII Reunión Científica de la SECyTA, la Sociedad ha concedido un total de 35 becas de inscripción a la Reunión de la SECyTA (que han supuesto un total de 8.800 €), 5 becas de inscripción combinada SECyTA+ITP (con un coste de 2.375 €) y 38 ayudas de viaje (7.600 €) a jóvenes investigadores socios de la SECyTA para la asistencia a los mencionados congresos.

3.3. Colaboración de la SECyTA con otros congresos.

La SECyTA colaboró en la celebración del 39th International Symposium on High Performance

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



Liquid Phase Separations and Related Techniques (HPLC 2013) celebrado en Amsterdam (Holanda) del 16 a 20 de junio de 2013. La colaboración consistió en la concesión de las 6 ayudas mencionadas anteriormente, apareciendo el logo de la Sociedad en la parte de "Supporting Organizations" de la web del HPLC 2013. Igualmente, la SECyTA colaboró con la celebración del 20th International Symposium on Electro- and Liquid Phase- Separation Techniques que se celebró en Tenerife en la misma semana y la misma sede que la Reunión Científica de la Sociedad (del 6 al 9 de octubre de 2013) concediendo 5 ayudas de inscripción combinada SECyTA+ITP, 7 ayudas de viaje y 2 ayudas de asistencia a congresos internacionales.

La SECyTA también apoyó la celebración del VI Workshop en Nanociencia y Nanotecnología Analíticas que tuvo lugar en Alcalá de Henares (Madrid) del 8 al 9 de julio de 2013, aunque, en este caso, no se recibió ninguna solicitud de ayuda para este congreso. Y la celebración de la IV Reunión Nacional de Dioxinas, Furanos y Compuestos Orgánicos Persistentes Relacionados, (Alicante. 26-28 de junio de 2013), concediendo las 2 ayudas de asistencia antes mencionadas.

3.4. *Temas Generales.*

Se sigue trabajando en la ardua tarea que iniciaron el Secretario y la Tesorera anteriores para conseguir la unificación de los listados de socios entre Secretaría, Tesorería y Boletín. Se ha llevado a cabo un proceso de actualización de los datos de los socios mediante el envío de cartas personalizadas a cada uno de los socios para que pudiesen comprobar los datos que actualmente constaban en los archivos de la Sociedad y pudiesen rectificar y/o actualizar todo aquello que fuese necesario. Una vez recibida la respuesta por parte de los socios se procedió a la actualización de dichos datos, tanto de Secretaría (dirección postal, e-mail, etc.) como de Tesorería (números de cuenta). En este proceso, se contactó directamente por teléfono o por e-mail con aquellos socios de los que no se tenían datos bancarios para poder poner en orden las cuotas de los socios activos y en caso de no ser posible contactar con estas personas se les dio de baja en la Sociedad, ya que no se podía realizar el cobro de las cuotas correspondientes.

Como ya ha comentado la Presidenta, en la reunión de la Junta de Gobierno del 31 de enero de 2013 celebrada en Madrid, también se aprobaron las nuevas

bases para la IX Edición de los premios José Antonio García Domínguez (patrocinados por Bruker) y la nueva normativa para la concesión de becas en sus distintas modalidades (asistencia a reuniones de la SECyTA, congresos internacionales y congresos patrocinados).

3.5. *Elecciones a la Junta de Gobierno*

Como se ha comentado y como se puede ver en las papeletas de votación, los cargos que se renuevan en octubre de 2013 son, por cese estatutario, 1 Vicepresidente y 3 vocales, y por renuncia para volver a la alternancia requerida por los estatutos de la Sociedad, el Tesorero.

3.6. *Publicidad de eventos.*

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

- 18 congresos nacionales e internacionales: VI Workshop NyNA; ITP-2013; HPLC-2013; IV Reunión Nacional de Dioxinas, Furanos y COPs; VI Reunión de la SEEM; 1er Congreso Argentino de Cromatografía y Técnicas Afines; ICCE-2013; 3rd European GCxGC Symposium; ICAAS-2013; 37th International Symposium on Capillary Chromatography and 10th GCxGC Symposium; ExTech-2013; RAFA-2013; Dioxin-2013; Euroanalysis-2013; MSB-2013; PREP-2013; SCM-6; ISC-214.
- 1 Webinar de una casa comercial.
- 4 cursos de especialización.
- Invitación de la Sociedad Italo-Latinoamericana de Etnomedicina, SILAE.
- Colaboración con la revista Life Science Lab.

3.7. *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:

- 10th Workshop on Liquid chromatography-tandem mass spectrometry for environmental analysis and food safety. Barcelona. 1 – 3 de julio 2014. Chairs: Drs. Damià Barceló and Mira Petrovic.

- Jornadas de Análisis Instrumental (JAI 2014). XIV Reunión Científica de la Sociedad Española de Cromatografía y Técnicas. Barcelona. 1 – 3 de octubre 2014. Chairwoman: Dra. M^a José González.
- 34th International Symposium on halogenated Persistent Organic Pollutants (POPs) - DIOXIN 2014. Madrid. 31 agosto – 5 septiembre 2014. Chairwoman: Dra. Begoña Jiménez.

4. Informe del Tesorero.

En el informe del Tesorero se trataron los siguientes asuntos.

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 desde la pasada Asamblea General celebrada en Tarragona el 15 de noviembre de 2012 (del 15-11-2012 al 6-10-2013). El Tesorero llama la atención sobre distintos puntos:

- Gracias a la reducción de los costes de edición del Boletín, actualmente se ha conseguido que el Boletín quede prácticamente autofinanciado por la publicidad (cosa que antes no ocurría).
- Los ingresos son algo mayores de los previstos ya que durante 2013 se ha pasado el cobro de dos cuotas, la correspondiente a 2012 (en febrero de 2013) y la del año en curso (en agosto de 2013).
- Queda pendiente contabilizar los gastos derivados de las becas concedidas en la XIII Reunión Científica y las ayudas internacionales para la asistencia al ITP.

A continuación, el Tesorero presenta el balance económico de la XII Reunión Científica de la SECyTA celebrada en Tarragona en 2012 y los gastos para la Sociedad derivados de la celebración de la XII Reunión Científica de la SECyTA, teniendo en cuenta las becas de inscripción y ayudas de viaje concedidas y los premios José Antonio García Domínguez.

El Tesorero hace hincapié sobre las ventajas que ha supuesto el cambio de entidad bancaria que son la mejora en los gastos bancarios y las facilidades que se tienen actualmente para el cobro y control de cuotas, reduciendo el número de impagados bancarios de 59 en 2012 a 9 en 2013.

Asimismo, hace constar que durante el presente año se ha creado una nueva base de datos bancaria en la aplicación del BBVA, se ha cerrado definitivamente la antigua cuenta de La Caixa y se han cerrado los antiguos depósitos que existían en La Caixa a 3 meses y se ha abierto un nuevo depósito en el BBVA (a 1 año).

Al igual que ha mencionado anteriormente la Secretaría, el Tesorero remarca que durante 2013 se ha seguido trabajando en la actualización de los datos en Tesorería y Secretaría.

Como ya se ha venido advirtiendo en asambleas anteriores, las próximas cuotas (2014 y años sucesivos) se pasarán a lo largo del primer trimestre del año.

6. Ruegos y preguntas

En este punto del orden del día, la Dra. María Teresa Galcerán informa que ella misma y el Dr. Xavier Guardino, como antiguos Presidente y Secretario de la SECyTA respectivamente, han procedido al cierre de una cuenta bancaria que aún quedaba abierta y hacen entrega al Tesorero del cheque con la cantidad remanente en dicha cuenta (1900 €).

La Dra. Mariluz Sanz, editora del Boletín de la SECyTA, 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). Asimismo, informa que, además de la rebaja que ha comentado el Tesorero de la imprenta Helios, actualmente se dispone también de una versión digital del Boletín que se colgará en breve en la web de la Sociedad.

El Dr. Vicente Ferreira interviene para proponer ideas sobre cómo fomentar la participación de los jóvenes investigadores en las reuniones científicas. Propone que se haga algo similar a lo que se hace en otros congresos científicos en los que los pósters se cargan en la página web una semana antes de la celebración del congreso para que puedan ser consultados y el comité científico selecciona varios de ellos para hacer “flash presentations”. También propone dar más visibilidad a las reuniones y todas las actividades que en ellas se desarrollan utilizando las redes sociales tan de moda hoy en día (Facebook, Twitter, etc.). A este respecto, la Presidenta de la Sociedad comenta que en

Nuevo Lanzamiento Chromeleon 7.2

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

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

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

Simplemente Inteligente

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



Preocupado por picos ausentes

¿Le preocupa no detectar impurezas importantes? ¿Quiere cuantificar contaminantes desconocidos sin patrones de referencia? Afronte sus desafíos cromatográficos con el nuevo detector de aerosol cargado **Thermo Scientific™ Dionex™ Corona™ Veo™**, con detección universal y respuesta independiente de la naturaleza del analito, incluso en ausencia de cromóforo. Cambie la manera en que ve sus resultados de HPLC/UHPLC.

en sus muestras?

• thermoscientific.com/Veo

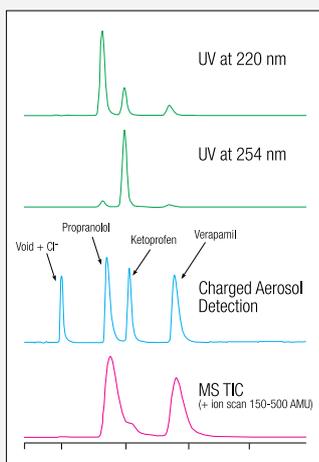


Detector de aerosol cargado Corona Veo
Consistente, sensible, versátil

- Datos de porcentaje de área precisos
- Compatibilidad con gradiente
- Amplio rango de aplicaciones
- Simple y fácil de usar

UHPLC⁺
focused

Detección de aerosol cargado
frente a UV y MS



Thermo
SCIENTIFIC

la celebración de las 13^{as} JAI se intentó utilizar Twitter para dar difusión al evento y a las actividades y la experiencia de los organizadores fue terrible ya que suponía mucho esfuerzo estar “posteando” continuamente noticias y el número de seguidores y la participación de los asistentes, incluidos los jóvenes, fue realmente escasa. Respecto a la posibilidad de hacer “flash presentation” de determinados pósters, la Secretaria de la Sociedad interviene comentando que, en su opinión, la cuestión más importante a la hora de comunicar a los jóvenes investigadores que su póster se ha convertido en una “flash presentation” es hacerlo con el tiempo suficiente para que lo puedan preparar y así puedan hacer la presentación más seguros y cómodos. Hasta donde ella sabe, el hecho de decirles a los jóvenes investigadores que tienen que exponer algo públicamente de un día para otro, les horroriza y reduce considerablemente el nivel de participación. Respecto a este mismo asunto, el Dr. Guillermo Ramis Ramos propone que los jóvenes investigadores hagan grupos de whatsapp que les permitan juntarse y estar en contacto con aquellas personas que estén interesadas en sus respectivos pósters de tal manera que las presentaciones se harían a un grupo reducido de personas que previamente han mostrado su interés por el trabajo en cuestión y no a una audiencia “genérica”. En este momento interviene el Dr. Xavier Guardino y comenta que la única forma de ver qué formato es el que mejor funcionaría es ir probando las distintas fórmulas y ver cuál tiene mayor participación y cual resulta más atractiva para todo el mundo. También comenta que en alguna ocasión lo que se hizo fue juntar a varios autores en el estrado e irles preguntando sobre sus respectivos trabajos. La Presidenta comenta que este formato se puso en práctica hace unos años como recordatorio de lo que se había hecho en el pasado y que con esa idea se hicieron las sesiones de discusión de pósters en Tarragona, pero que, lamentablemente, estas sesiones no fueron muy exitosas ni para los jóvenes investigadores implicados, ni para los organizadores de las sesiones, ni para los asistentes. La Dra. María Teresa Galcerán comenta que todos estos formatos de foros de discusión tuvieron mucho éxito cuando se discutía sobre cromatografía y sobre los problemas prácticos que tenían los jóvenes cromatografistas, sin embargo, lamenta que hoy en día es muy difícil encontrar incluso un cromatograma en muchos de los pósters.

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

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

- Votos emitidos válidos: 102 (90 votos en sala y 12 recibidos por correo)
- Votos nulos: 6

El reparto de los votos emitidos ha sido el siguiente:

| Cargo | Candidato/a | Votos |
|----------------|--|-------|
| Vicepresidenta | Dra. Yolanda Picó García | 83 |
| Tesorero | Dr. Jordi Díaz Ferrero | 84 |
| Vocales | Dra. Ana M ^a García Campaña | 90 |
| | Dr. Miguel Ángel Pérez Alonso | 58 |
| | Dr. Juan Vicente Sancho Llopis | 75 |
| | D. Javier Rodríguez Serrano | 37 |

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

| | |
|-----------------|--|
| Presidenta: | María José González Carlos (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid) |
| Vicepresidenta: | Elena Ibáñez Ezequiel (Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, CSIC, Madrid) Yolanda Picó García (Universidad de Valencia) |
| Secretaria: | Belén Gómara Moreno (Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid) |
| Tesorero: | Jordi Díaz Ferrero (Instituto Químico de Sarriá, Universitat Ramon Llull, Barcelona) |
| Vocales: | Ana María García Campaña (Universidad de Granada) |
| | Joan Grimalt Obrador (Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua, CSIC, Barcelona) |

Begoña Jiménez Luque
(Instituto de Química Orgánica
General, CSIC, Madrid)
José Monge Cónsul
(Agilent Technologies Spain, S.L.,
Barcelona)
Miguel Ángel Pérez Alonso
(Bruker Española, S.A.)
Juan Vicente Sancho Llopis
(Universitat Jaume I, Castellón)
José M^a Sangenís
(Leco Instrument, S.L.)
Fco. Javier Santos Vicente
(Universidad de Barcelona, Barcelona)
María Luz Sanz Murias
(Instituto de Química Orgánica
General, CSIC, Madrid)
Juan Solé Ribalta
(HiTC, S.A., Barcelona)

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

En este punto del orden del día y a la vista de que no hay más ruegos ni preguntas ni más asuntos que tratar y que el proceso electoral ha finalizado, la Presidenta da por finalizada la XIII Asamblea General de la SECyTA a las 19:05 h. del citado día.

Belén Gómara Moreno
Secretaria de la SECyTA





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

JUNTA DE GOBIERNO DE LA SECyTA (2013)

En la pasada 13ª Asamblea General de la SECyTA, celebrada el 10 de octubre de 2013 en el marco de la XIII Reunión Científica de la SECyTA, se procedió a la renovación de parte de la Junta de Gobierno de nuestra sociedad, quedando constituida como se muestra a continuación:



Elena Ibáñez Ezequiel
Vicepresidenta



María José González Carlos
Presidenta



Yolanda Picó García
Vicepresidenta



Belén Gómara Moreno
Secretaria



Jordi Díaz Ferrero
Tesorero



Juan O. Grimalt Obrador
Vocal



Javier Santos Vicente
Vocal



José Monge Cónsul
Vocal



Ana M. García-Campaña
Vocal



Juan Vicente Sancho Llopis
Vocal



Joan Sole Ribalta
Vocal



Miguel Ángel Pérez Alonso
Vocal



Mª Luz Sanz Murias
Vocal



Begoña Jiménez Luque
Vocal



José Mª Sangenís Magraso
Vocal

NUEVOS SOCIOS DE LA SECyTA

1707

Rodríguez Gonzalo, Encarnación
C/ Ministro Fernández Ordóñez, 3 3ºF
37900 SANTA MARÍA DE TORMES (SALAMANCA)

1708

Calvillo Hernández, Inmaculada
Av. León, 26
28804 ALCALÁ DE HENARES (MADRID)

1709

Celeiro Montero, María
Urbanización Montecelo
C/ San Vicente de Pedreda, 12
27191 LUGO

1710

Seró Llor, Raquel
Av. de Madrid, 13 30 1ª
25002 LLEIDA

1713

Moncayo Martínez, Liliana
C/ Luis Sallenave, 13 2ºD Esc. C
50007 ZARAGOZA

1715

Llompart Vizoso, María
Facultad de Química
Universidad de Santiago de Compostela
Av. de las Ciencias, s/n
15782 SANTIAGO DE COMPOSTELA (A CORUÑA)

1718

Gorga López, Marina
Urb. Pla de les Roques. Can Canyelles s/n
08296 CASTELLBELL I EL VILAR (BARCELONA)

1721

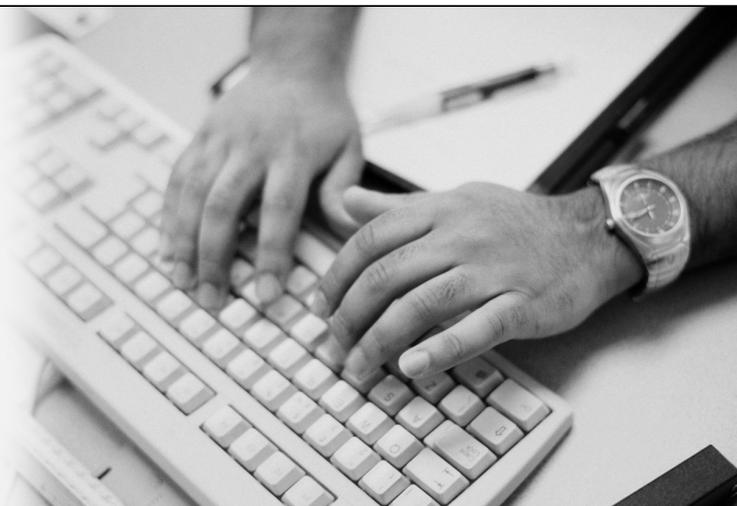
Echeverría Barillas, Silvia Lavinia
Facultad de Química
Universidad Rovira i Virgili
C/ Marcel·li Domingo, s/n
43007 TARRAGONA

1722

Hernández Córdoba, Manuel
Departamento de Química Analítica
Facultad de Química
Universidad de Murcia
Campus de Espinardo
30100 MURCIA

NOTA DE LA REDACCIÓN

*Desde el Comité Editorial
os animamos a que nos enviéis
toda aquella información
que consideréis de interés
(premios, jubilaciones, etc.)
para su difusión entre
los lectores del boletín.*





INFORMACIONES

39th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON HIGH PERFORMANCE LIQUID PHASE SEPARATIONS AND RELATED TECHNIQUES

The '39th International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques' was held in Amsterdam (the Netherlands) at the RAI Congress Center on June 16-20, 2013. The symposium was organized by Prof. Peter Schoenmakers and Prof. Wim Kok (Analytical Chemistry/Forensic Science Department, Van't Hoff Institute for Molecular Sciences, University of Amsterdam).

The HPLC 2013 covered all of the diverse aspects of liquid phase separations including advances in the understanding of the fundamental processes underlying liquid chromatography.

Regarding oral communications, the final program was divided into three thematic groups, which were presented in different lounges: The *Hyperformance LC group* which included topics like chromatography fundamentals, improving efficiency, selectivity, column technology including stationary phases, and (ultra-) high pressure liquid chromatography, among others; the *High-impact LC group* dealt with challenges currently facing the HPLC community, sample preparation, novel methods of analysis and applications; and the *HPLC-MS group* focused on the discussion about synergy between LC and MS, mass spectrometer instrumentation, ionization techniques and on-line and off-line couplings, among others.

Moreover, in other lounges several tutorials with general topics were conducted during the congress. They were very useful for amateur chromatographers. Among them, it is important to remark on the tutorial about silica and non-silica polymer monoliths presented by Prof. Nobuo Tanaka and Prof. Emily Hilder, as well as the tutorial on 'Environmental analysis' and 'Residue analysis' by Prof. Marja-Liisa Riekkola and Prof. Yolanda Picó, respectively. They offered a general view of the extraction techniques suitable for each group of analytes as well as the features of each device for the different types of the analysis. Other notable tutorials as 'Quantitative LC-MS' by Prof. Uwe Karst, 'Comprehensive two dimensional liquid chromatography' by Prof. Paola Dugo and 'Column efficiency' by Dr. Fabrice Gritti took place.

Various scientific discussions on different topics like the need for improvements in pharmaceutical, environmental, food, and polymer analysis, as well as discussion on the needs for metabolomics and forensics, respectively, took place along the entire symposium.

Nevertheless, it should be remarked the discussion entitled 'Discussion on needs for polymer analysis' which had high scientific level and participation. Concerning the poster session, they were divided in 35 categories. Among them a large number of posters were included in sample preparation, chromatography fundamentals and monoliths sections (38, 37 and 35 posters, respectively). It is worth noting the high number of poster contributions presented by Spanish researchers (82 of 915 posters). Forensic studies was the category which included the most Spanish posters (approx. 50%), followed by environmental (approx. 40%) and chemometrics (approx. 30%) sections. Oral communications presented by Spanish researchers comprised 5% of the total.

On the first conference day, four short courses were imparted, and two of them were taught by Spanish researchers: 'Sample Preparation' (Dr. Lourdes Ramos and Dr. María Luz Sanz, IQOG, CSIC, Spain), 'Comprehensive Two-Dimensional Liquid Chromatography (LC×LC)' (Dr. Dwight Stoll and Dr. Xiaoli Wang, Gustavus Adolphus College, US and Agilent Technologies, Wilmington, DE, US), 'LC-MS(/MS)' (Dr. Gérard Hopfgartner, University of Geneva, CH) and 'Retention Mechanisms in HPLC' (Prof. María Celia García-Álvarez-Coque and Prof. José Ramón Torres-Lapasió, University of Valencia, Spain). The short courses were followed by the opening ceremony of the conference which was prelude with an incredible African rhythms with Djembes played by 'Drum Café' and followed by four plenary sessions presented by Prof. Jos Beijnen, Dr. Ron Majors, Prof. Michel Nielen and Prof. Stefan Bruns. Finally, Prof. Paul Ferguson presented the ChromSoc Awards.

The second day of HPLC 2013 congress started with interesting lectures about new advances in liquid chromatography columns and separation. The presence of speakers like Prof. Frantisek Svec ('Monolithic Columns in Thin Layer Format for TLC-MS Separations'), Prof. Pat Sandra ('State-of-the-art Liquid Chromatography for (Bio) Pharmaceutical Analysis') and Prof. Marja-Liisa Riekkola ('Analytical Challenges Related to the Elucidation of the Chemical Compounds Taken Part in Atmospheric Aerosol Formation') among others gives an idea of the high level of the lectures in the symposium. Meanwhile, more scientific communications were developed in different rooms giving a total of three or four parallel lectures in the RAI Congress Centre. For instance, some lectures dealt with new ionization methods in mass



spectrometry (chip based miniaturized atmospheric pressure ionization techniques, laser-spray ionization (LSI), etc.) in order to overcome some of the limitation of the classic ionization sources, such as electrospray ionization (ESI), with a gain in simplicity and sensitivity. Moreover, several communications exposed the current environmental concerns and they showed that LC×LC or GC×GC coupled to mass spectrometry using powerful analyzers are suitable and reliable techniques for monitoring emerging contaminants in a wide range of environmental samples.

Some of the most remarkable lectures presented on the third conference day were: 'High-efficiency and high peak capacity chromatographic separations methods for proteome analysis' by Prof. Christian G. Huber, 'A new particle for liquid chromatography' by Prof. Peter Myers, corresponding to High-impact LC (Proteomics) and Hyperformance LC (columns) categories, respectively; 'Efficiency in (Ultra-high-pressure) size-exclusion chromatography' by Dr. Elena Uliyanchenko and 'Recent progress in core-shell and embedded nanoparticle layers for the separations and sensing of biomarkers and cell signaling molecules' by Prof. Jeremy D. Glennon, within the High-impact LC (Polymer separations) and HPLC-MS (Biomedical LC-MS) categories, respectively.

On the fourth day, the oral communications 'Orbitrap vs QTOF to determine pesticide residues in fruit and vegetable extracts' presented by Prof. Yolanda Picó and 'Orbitrap MS: past, present and future' presented by Dr. Alexander Makarov were relevant. The latter speaker explained future trends and perspectives on Orbitrap mass spectrometry and developments in LC-MS/MS techniques. They tend to create new hybrid devices which contain different mass analyzers (QqQ, IT, LIT, TOF, Orbitrap) in order to combine the individual advantages of each one regarding specificity, mass accuracy, mass resolution and selectivity.

On the last day of the symposium, many novel and interesting topics were introduced to the audience. Forensics was one of the main topics of this day. Some lectures must be remarked as 'Forensic challenges for LC and LC-MS' by Prof. Arian van Asten (Netherlands Forensic Institute, The Hague, Netherlands) and 'Rapid separations of improvised explosives' by Prof. Michael Breadmore (University of Tasmania, Hobart, Tasmania, Australia). Although the use of LC×LC has been extensively treated during the conference, the last day was specifically reserved for a whole session on this topic. It was presented as a truly powerful tool in order to resolve complex samples. Apart from these interesting lectures, the one

given by Prof. Pavel Jandera (University of Pardubice, Pardubice, Czech Republic) should be emphasized because he has been one of the pioneers of this methodology in Europe. His lecture, entitled 'Comprehensive two-dimensional LC×LC using combinations of monolithic capillary columns and chort core-shell columns' was mainly focused to current trends on LC×LC separations. Nevertheless, Prof. Koji Otsuka's (Kyoto University, Kyoto, Japan) lecture, entitled 'Towards high-sensitive detection in microscale electrophoresis using on-line sample concentration' should also be highlighted as an interesting talk for researchers working with CE separation technique. He presented an excellent overview about alternatives to improve sensitivity in CE through pre-concentration strategies such as large volume sample stacking (LVSS). These strategies make CE a competitive separation tool when it is compared with LC.

Finally, the HPLC 2013 Symposium ended with the lecture of Prof. Peter Schoenmakers, the meeting organizer. His lecture about 'High-impact liquid chromatography' was a magnificent closure to such an interesting scientific meeting. This closure included the award presentations, where the popular poster award was given to a Spanish research group (Fernando Benavente, Department of Analytical Chemistry, University of Barcelona). Lastly, the 'Farewell reception' was a perfect closure of this event due to its congenial atmosphere. To conclude, the symposium offered presentations and discussions of a high scientific level with an important participation of Spanish researchers in virtually all the scientific fields and a very good organization.

This interesting scientific program was accompanied by several social events. The organizing committee surprised all the attendees with an invitation for a canal cruise along the city. Moreover, it is worth highlighting the social dinner celebrated at Rhone Congress & Party Center on Wednesday, where the organization offered a typical 'Dutch barbecue' that encouraged participants to continue the scientific discussion in a more informal way.

**Alina Astefanei¹, Enrique Javier Carrasco-Correa²,
Núria Gilart³, Maykel Hernández-Mesa⁴,
Ana Masiá², Sonia Rodríguez-Sánchez⁵**

¹University of Barcelona; ²University of Valencia;

³University Rovira i Virgili; ⁴University of Granada;

⁵Institute of General Organic Chemistry (CSIC), Madrid

IV NATIONAL MEETING ON DIOXINS, FURANS AND RELATED PERSISTENT ORGANIC COMPOUNDS

The fourth edition of the “National Meeting on Dioxins, Furans and Related Persistent Organic Pollutants” was held from 26th to 28th, June 2013 at the Meliá Alicante, located in the city of the same name. Dr. Juan Antonio Conesa, professor in the department of chemical engineering at the University of Alicante, chaired the local organizing committee, which also consisted of thirteen other academic members from the same University. The scientific committee consisted of eight representatives of renowned universities and research centers of Spain.

The meeting opened on June 26th with speeches by Mr. Enrique Herrero, Director of the Bureau of Research of the University of Alicante, Mr. Luis Barcala, Councillor for Health, Consumer Affairs and Environment of the City Council of Alicante, and by Dr. Juan Antonio Conesa, chief organizer of this event.

A total amount of 29 oral and 19 poster communications distributed in five thematic sections were presented. Four of these thematic sections were introduced in the form of high scientific quality plenary lectures by internationally renowned figures in the field of POPs:

- i) **Global distribution of POPs**, with four oral presentations including the plenary lecture “Old sins throw long shadows: PCBs -40 years after restrictions in Switzerland-still an environmental problem?” by **Markus Zennegg** from the Swiss Federal Laboratories for Materials’ Science and Technology, in Dübendorf, Switzerland.
- ii) **Exposure to POPs. Regulation, policy and management of the Life Cycle**, with five oral presentations including the plenary lecture “Flame retardants in the environment: an overview”, by **Mehran Alaei**, from the Water Science and Technology Directorate of Environment Canada in Burlington, Canada.
- iii) **Analytical methods and quality control**, with eight oral presentations including the plenary lecture “Recent advances in blood analyzes for POPs”, by **Jean-François Focant**, from the Center for Analytical Research and Technologies of the University of Liege, Belgium.
- iv) **Formation, sources and inventories of dioxins and related compounds**, with six oral communications.

- v) **Food and feed. Toxicology and health**, with six oral presentations including the plenary lecture “Wide range of aspects related to POPs in the food chain: from contributions of the EU-RL/NRL for dioxins and PCBs in feed and food network to human biomonitoring of POPs” by **Rainer Malisch** from the Reference Laboratory of the European Union (EU-RL) for Dioxins and PCBs in food and feed, in Freiburg, Germany.

This event was sponsored by several companies such as *Thermo Scientific*, *Waters*, *Agilent*, *Perkin Elmer*, *Bruker* and *Techno Spec*, which set up a trade show of their analytical products. Also, representatives of *Thermo Scientific*, *Waters*, *Agilent* and *Bruker* delivered oral communications explaining their major advances in analytical instrumentation and technology.

The last speaker of the meeting was Ms. Cristina Perdiguero, Head of Service of the Directorate General of Fisheries Economics of the Ministry of Agriculture, Food and Environment. Ms. Perdiguero explained the work and involvement of the Ministry at the international, European and Spanish levels in relation to residue values of contaminants allowed in food. She also emphasized the crucial importance of scientific research, which is the only responsible for our current knowledge about the occurrence and behavior of POPs and other pollutants in the environment.

The fourth edition of this meeting was closed on Friday, June 28th by Dr. Begoña Jiménez from the Institute of Organic Chemistry (IQOG) of CSIC in Madrid, by Dr. Esteban Abad from the Institute of Environmental Assessment and Water Studies (IDAEA) of CSIC in Barcelona, and Dr. Juan Antonio Conesa. Dr. Begoña Jiménez introduced the celebration of the international conference in the field of POPs “DIOXIN 2014, the 34th International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants” in Madrid from August 31st to September 5th, 2014. Dr. Esteban Abad and Dr. Juan Antonio Conesa stressed the quality and scientific interest of the works presented at the meeting, and urged potential organizers to take over the planning of the future fifth edition of it.

Ángel García-Bermejo Pérez y Juan Muñoz Arnanz
Dpto. de Análisis Instrumental y Química Ambiental
IQOG-CSIC, Madrid.

**17th EUROPEAN CONFERENCE ON ANALYTICAL CHEMISTRY (EUROANALYSIS XVII)**

The scientific conference Euroanalysis XVII was held at Warsaw University of Technology (Poland) on August 25th-29th 2013. The program of this meeting covered different aspects such as education in analytical chemistry, analytical methods for cultural heritage and art, sample preparation, separation techniques, new analytical instrumentation, miniaturization and nanoanalytics, developments in electrochemistry, sensors and biosensors, chemometrics and quality assurance and metrology in different fields of analysis (biomedical, environmental, foods, industrial and process analysis, etc).

The conference program for the first day included three short courses entitled: 'Fundamentals and recent developments in mass spectrometry', 'Isotope Dilution ICP-MS-MS', and 'Quality in analytical sciences'. These courses were respectively taught by Witold Danikiewicz, professor at the Institute of Organic Chemistry of the Polish Academy of Sciences in Warsaw; Emilia Vassileva, research scientist at the IAEA-Environmental Laboratories in Monaco; and Nineta Majcen, general secretary of the European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS). The other four-day scientific program consisted of a total of seventy-six oral presentations, seven of which were plenary lectures, and 582 posters. Parallel to the scientific sessions, a trade exhibition from different instrumentation/consumables suppliers or companies was held.

The second day of the symposium started with the first plenary lecture on 'The history of the Polish analytical chemistry-since 1945' by Professor Adam Hulanicki. It was followed by several oral presentations in two parallel conference rooms, covering the topics 'Education in analytical chemistry' and 'Chemometrics, quality assurance and metrology'.

The third day, after a plenary lecture on 'Analysis, characterization, fate and behaviour of nanomaterials in the total environment' by Prof. Damià Barceló, a total of 16 oral presentations were scheduled in two parallel sessions on 'Environmental analysis' and 'Recent progress in modern analysis'. In the evening, the first poster session was available. A total of 290 posters within the environmental and biomedical analysis, inorganic and technological chemistry, and

electrochemical analysis were exposed. In the evening, a performance on typical Polish dances was offered as part of the Social Programme of the Conference.

The fourth day started with a plenary lecture on 'Medical applications of Chip Integrated Acoustophoretic cell separation' by Thomas Laurell and continued with several interesting oral presentations distributed within the following sessions: 'Biomedical and forensic analysis', 'Electrochemical methods and devices', 'Separation techniques' and 'Analytical methods for cultural heritage and art'. Afterwards, the second poster session was held with the presentation of 292 communications on the topics above described.

The fifth day, a plenary lecture entitled 'Quantitative structure-retention relationships (QSRR) as an auxiliary analyte identification tool in Omics' by Prof. Roman Kaliszan, was followed by several oral presentations related to 'Trace element analysis and speciation', 'Food analysis' and 'Industrial and process analysis'. Finally, in the Closing Ceremony, the Polish Chemical Society Prize was awarded to the best oral presentation on separation techniques, and Springer also announced the prizes for the three best poster presentations. At the end of this ceremony, organizers invited all attendees to the next edition of the congress to be held in Bordeaux (France) on 6th-11th September 2015. Overall, this conference was the best environment for sharing analytical knowledge which might lead to future collaborations.

Laura Ruiz Aceituno
Maria Francesca D'Agostino
Inst. Química Orgánica General (CSIC)

ITP 2013 - 20th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ELECTRO - AND LIQUID PHASE - SEPARATION TECHNIQUES

The '20th International Symposium on Electro- and Liquid Phase- Separation Techniques' took place on 6-9 October 2013 in the Hotel Beatriz Atlantis located in Puerto de la Cruz (Tenerife, Spain). The organizing committee was composed of several national and international renowned scientists and it was chaired by Dr. Javier Hernández Borges, from the University of La Laguna, and Prof. Alejandro Cifuentes, from the Institute of Food Science Research (CIAL, CSIC-UAM).

The first day, two opening plenary lectures were presented. Dr. Salvatore Fanali, from the Institute of Chemical Methodologies of Consiglio Nazionale delle Ricerche (Italy), gave an overview over different approaches developed in capillary chromatography and electrochromatography and its coupling with mass spectrometry, while Professor Ziad El Rassi, from Oklahoma State University of USA, described different strategies for profiling glycoproteins and their potential as biomarkers. The evening finished with a welcome cocktail in the terrace of the hotel.

Next morning started with 3 parallel sessions. The first one entitled 'Advanced food analysis and Foodomics-1' was mostly focused on the development and application of high-throughput approaches (metabolomics, proteomics or foodomics) for the analysis of foods, their constituents (e.g. bioactive compounds), contaminants (e.g. mycotoxins), etc. At the same time, in the session 'Nanotech & Microchips-1', different microchip devices, new manufacture methodologies and the application of two-dimensional microfluidic techniques for separation of DNA were presented by different speakers. Meanwhile, more theoretical lectures were taking place on 'Fundamentals-1' session. The second session was split into three parallel sessions entitled 'Hyphenated', 'Bioanalysis' and 'New Applications', focused on new perspectives in the use of separation techniques in these fields. Concerning the poster sessions, 147 communications were presented in two different sessions. It has to be highlighted the high quality level of the communications presented spanning a wide variety of topics such as chiral analysis, omics, forensic analysis, etc. After the first poster exhibition, the third session took place in three parallel sessions: session 3A focused on new sample preparation

methodologies coupled to separation techniques, session 3B which described new methodologies based on separation techniques and session 3C dedicated to application of separation techniques for omics studies.

In the afternoon, parallel sessions scheduled were: 'Hyphenated-2' (session 4A), coupling of microchips and dielectrophoresis to separation techniques (session 4B) and 'Forensic and Methodologies' (session 4C). On Monday evening, after the fourth session, the social dinner was held in "La Gañanía" restaurant, located in a pleasant environment with fantastic views.

On the third day, the conference started with three parallel sessions. Session 5A focused on new achievements in the field of bioanalysis, session 5B concerned the power of nanotechnology and microchips in analysis, while session 5C presented new applications of capillary electrophoretic and chromatographic techniques. ITP 2013 incorporated a new session as compared with previous editions: the Young Scientists Plenary Session. This session took place on Tuesday at midday with the participation of seven young researchers who presented their interesting investigations. The scientific and organizing committee idea of making this session as plenary was massively lauded because it gave the chance to all participants to attend this session and also to the young researchers to explain, discuss and defend their works in front of some of the most outstanding analytical chemists from all over the world. After lunch, Tuesday afternoon began with the fifth session which was divided into three parallel sessions and each session consisted of five lectures. The session 'Advanced food analysis and Foodomics-2' was mostly focused on the food security through metabolomics, but also on the analysis of bioactive compounds. At the same time, the 'Fundamentals-2' session was based on optimization of methods by LC or CE. Meanwhile the 'Hyphenated-3' session included new perspectives in the use of separation techniques coupled with mass spectrometry. The day ended with a trip to the wonderful National Park 'Las Cañadas del Teide' and a fantastic traditional Canarian folklore exhibition.

The morning of the last day of the conference was started by the Closing Plenary Lectures presented by



Elena Ibáñez (from CIAL, CSIC-UAM, Spain) and Jonas Bergquist (from Uppsala University, Sweden). Prof. Ibáñez presented an interesting lecture on “Green Foodomics”, where she showed practical, innovative and environmentally friendly applications performed in her laboratory. During the lecture it was also presented the development of these applications from the angle of other techniques, and the general strategy to measure the environmental impact of performed in the laboratory experiments. Later, Prof. Bergquist, with the lecture entitled “Population-based Omics”, gave an overview over his running projects involving omics technologies with a particular focus on mass spectrometry-based metabolomics. Prof. Bergquist showed how non-targeted metabolomics strategies are opening new frontiers in the discovery of disease-specific markers and gave a few examples of very ambitious and impressive results obtained in his laboratory. Finally, in the closing ceremony, the ‘21st International Symposium on Electro- and Liquid

Phase- Separation Techniques (ITP 2014)’ to be held in Brazil, was presented by Prof. Marina F. M. Tavares.

M^a Ángeles Fernández, *Department of Analytical Chemistry, University of Alcalá*; **Miguel Guijarro**, *Department of Analytical Chemistry, University of Alcalá*; **Clara Ibáñez**, *Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research (CIAL, CSIC-UAM)*; **Cristina Montealegre**, *Department of Analytical Chemistry, University of Alcalá*; **David Moreno**, *Department of Analytical Chemistry, University of Granada*; **Patrycja Puchalska**, *Department of Analytical Chemistry, University of Alcalá*; **Carolina Quesada**, *Department of Analytical Chemistry, University of Granada*; **Laura Sánchez**, *Department of Chemistry, University of Aalen (Aalen, Germany)*; **Alberto Valdés**, *Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research (CIAL, CSIC-UAM)*.

CALENDARIO DE ACTIVIDADES

- 1. Symposium on Hyphenated Techniques in Chromatography and Separation Technology. HTSP-3: 3rd International Symposium on Hyphenated Techniques for Sample Preparation**
28 - 31 Enero de 2014. Brujas (Bélgica)

Chairman: Prof. Hernán Cortés
www.htc-conference.org

- 2. 4 GPE: 4th International Congress on Green Process Engineering**
7 - 14 Abril de 2014. Sevilla (España)

Co-chairmen:
Pedro Lozano (plozanor@um.es)
Santiago V. Luis (luis@uji.es)
Secretaría Técnica:
gpe2014@inp-toulouse.fr
<http://www.gpe2014.org/>

- 3. MSB 2014: 30th International Symposium on Microscale Bioseparations**
27 abril - 1 Mayo de 2014. Pécs (Hungría)

Chairman: Ferenc Kilár
Co-chairmen: Attila Felinger y András Guttman
www.msb2014.org

- 4. HPLC 2014: 41st International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques**
11 - 15 Mayo de 2014. Nueva Orleans, Louisiana (EE.UU.)

Symposium Chair : Prof. J. Michael Ramsey
Ms. Janet Cunningham
(HPLC 2014 Symposium/Exhibit Manager)
www.Linkedin.com/in/BarrEnterprises
janetbarr@aol.com
www.HPLC2014.org

- 5. 38th International Symposium on Capillary Chromatography and 11th GCxGC Symposium**
18 - 23 Mayo de 2014. Riva del Garda (Italia)

Chairman: Prof. Luigi Mondello
Mrs. Alberta Costa (Congress Manager)
meeting@rivafc.it
<http://rivadelgardafierecongressi.it/>

- 6. ExTech 2014: 16th International Symposium on Advances in Extraction**
25 - 28 Mayo de 2014. Chania, Creta (Grecia)

Chairwoman: Prof. Elia Psillakis
Z. Dokou (Secretaría Técnica)
extech2014@enveng.tuc.gr
<http://www.extech2014.tuc.gr/welcome>

- 7. 10th Annual LC/MS/MS Workshop on Environmental Applications and Food Safety**
1-3 Julio de 2014. Barcelona (España)

Conference Secretariat: Dr. Mira Petrovic
Catalan Institute for Water Research (ICRA)
mpetrovic@icra.cat

- 8. PREP 2014: 27th International Symposium on Preparative and Process Chromatography**
20 - 23 Julio de 2014. Boston, Massachussets (EE.UU.)

Ms. Janet Cunningham (PREP Symposium/
Exhibit Manager)
www.Linkedin.com/in/BarrEnterprises
janetbarr@aol.com
<http://www.prepsymposium.org/>

- 9. Dioxin 2014: 34th International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants**
31 de Agosto - 5 de Septiembre. Madrid (España)

Chair: Dra. Begoña Jiménez
Secretaría Técnica:
MCI Spain
dioxin2014@mci-group.com
www.dioxin2014.org

- 10. ISC 2014: 30th International Symposium on Chromatography**
14 - 18 Septiembre de 2014. Salzburgo (Austria)

PCO Tyrol Congress (Conference Secretariat)
Rennweg 3, A-6020 Innsbruck, AUSTRIA
i.kaehler@cmi.at
www.pco-tyrolcongress.at



ARTÍCULOS DE INTERÉS

La cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (GC-MS) sigue siendo actualmente una técnica ampliamente utilizada en el análisis de una gran variedad de compuestos orgánicos volátiles y semivolátiles, debido a su elevada versatilidad, capacidad de separación y sensibilidad. La ionización electrónica (EI) y la ionización química (CI) son los modos de ionización más ampliamente utilizados en el acoplamiento GC-MS. En general, la ionización electrónica permite obtener información valiosa sobre la estructura química de las moléculas y proporciona una elevada reproducibilidad y robustez. No obstante, el hecho de que la EI sea una técnica de ionización muy energética, hace que en ocasiones se pierda parte de la información estructural debido a una excesiva fragmentación. Por el contrario, la CI es una técnica de ionización suave que permite obtener espectros con un menor grado de fragmentación y, por tanto, proporciona una mayor sensibilidad. Sin embargo, los mecanismos de fragmentación en CI dependen de un gran número de variables, como la naturaleza del gas de reacción, la energía electrónica aplicada, la temperatura de la fuente o la naturaleza del analito, y, por tanto, no puede ser considerada como una técnica universal de ionización a diferencia de la EI. Además, el campo de aplicación de la CI se circunscribe al análisis de ciertas familias de compuestos para los que esta técnica es especialmente adecuada.

En los últimos años ha aumentado el interés por disponer de métodos de cribado o screening que permitan el análisis cualitativo y cuantitativo de un elevado número de compuestos mediante GC-MS. Por esta razón, técnicas como la ionización química a presión atmosférica (APCI), que hasta el momento parecían estar destinadas al acoplamiento LC-MS, se han incorporado como modos de ionización en GC-MS. La técnica APCI, utilizada por primera vez en un sistema GC-MS hace más de cuarenta años, ha sido redescubierta recientemente debido a que aporta las ventajas de las técnicas de ionización blandas y abre un nuevo abanico de posibilidades al acoplamiento de la cromatografía de gases con la espectrometría de masas, en especial con instrumentos de alta resolución. Desde su comercialización como fuente en equipos de GC-MS, el número de publicaciones ha ido aumentando progresivamente y en estos momentos podemos encontrar aplicaciones en campos de investigación

tan diversos como el medio ambiente, seguridad alimentaria, metabolómica, análisis de productos naturales y caracterización de productos derivados del petróleo.

A continuación se comentan tres artículos científicos publicados recientemente donde se presentan tres ejemplos de aplicación del acoplamiento GC-APCI-MS.

“Improved gas chromatography-tandem mass spectrometry determination of pesticides residues making use of atmospheric pressure chemical ionization”

Tania Portolés, Laura Cherta, Joaquim Beltran, Félix Hernández

Journal of Chromatography A 1260 (2012) 183-192.

En este artículo, los autores evalúan la aplicabilidad de la fuente APCI en el acoplamiento GC-MS/MS para la identificación y determinación de residuos de pesticidas en frutas y vegetales. Como continuación de trabajos anteriores, donde los autores centraron sus investigaciones en aspectos relacionados con la interpretación de los mecanismos de ionización y el estudio del acoplamiento GC-APCI-MS, en este trabajo se aborda el análisis simultáneo de 25 pesticidas mediante GC-APCI-MS/MS con analizador de triple cuadrupolo (QqQ). Los compuestos estudiados fueron seleccionados teniendo en cuenta la problemática asociada a su determinación mediante GC-EI-MS/MS, debido a que presentan una elevada fragmentación y es difícil encontrar transiciones específicas para su análisis por MS/MS.

En una primera etapa, los autores establecieron las condiciones de ionización de estos compuestos mediante APCI, observando diferencias importantes respecto a los espectros obtenidos con EI. En general, el uso de la fuente de APCI disminuye significativamente la fragmentación de los compuestos y aumenta la abundancia del ion molecular, así como de algunos iones fragmentos característicos. Además, los autores comprobaron que la presencia de trazas de vapor de agua en la fuente de APCI favorece la formación de los iones $[M+H]^+$ como resultado de un proceso de transferencia protónica. La optimización de las condiciones de la fuente para aumentar la abundancia de estos

iones permite su utilización como precursores para trabajar en MS/MS. Una vez optimizado el flujo de gas portador y los voltajes de cono de la fuente APCI, se establecieron las condiciones de MS/MS para la determinación de los compuestos de interés, seleccionando en cada caso las transiciones más específicas para trabajar en el modo SRM (*selected reaction monitoring*).

El método desarrollado se aplicó al análisis de muestras complejas de frutas y vegetales, utilizando un método QuEChERS de extracción y purificación de los extractos (método oficial 2007.01 de la AOAC). Los resultados obtenidos mostraron ventajas evidentes en el uso de la fuente de APCI frente a EI en el análisis de pesticidas en este tipo de matrices, obteniéndose una elevada selectividad y sensibilidad, así como bajos límites de detección (0.02-2 µg/Kg). Los excelentes resultados obtenidos en este trabajo permiten considerar a la técnica GC-APCI-MS/MS como un método útil y sensible para el análisis de residuos de pesticidas. En este sentido, estos mismos autores han ampliado recientemente este estudio (*J. Chromatogr. A 1314 (2013) 224-240*) al análisis simultáneo de un mayor número de pesticidas (175 compuestos) en muestras de frutas y verduras de diferente naturaleza utilizando esta misma técnica de determinación.

“Novel Analytical methods for flame retardants and plasticizers based on gas chromatography two-dimensional gas chromatography, and direct probe coupled to atmospheric pressure chemical ionisation-high resolution time-of-flight-mass spectrometry”

Ana Ballesteros-Gómez, Jacob de Boer, Pim E.G. Leonards.

Analytical Chemistry 85 (2013) 9572- 9580.

En este trabajo se estudia la aplicabilidad de la cromatografía de gases (GC) y la cromatografía de gases bidimensional completa o integrada (GC×GC) acopladas a la espectrometría de masas de alta resolución con analizador de tiempo de vuelo (HRTOF-MS) y fuente de ionización química a presión atmosférica (APCI), para la identificación y determinación de diversas familias de retardantes de llama en residuos electrónicos y componentes del automóvil. En este artículo, se evalúa también la técnica de ionización directa (*ambient ionization*) combinada con APCI-HRTOF-MS como método de detección rápido para el screening de estos contaminantes en muestras sólidas.

Una vez optimizadas las condiciones de separación mediante GC y GC×GC de los compuestos seleccionados se establecieron las condiciones de ionización de la fuente de APCI. Entre los parámetros críticos destaca la temperatura de la fuente que influye negativamente en la detección de algunos de los compuestos de interés, como es el caso de los difeniléteres polibromados (PBDEs), debido a que algunos de estos compuestos son termolábiles. Los métodos desarrollados permitieron la adecuada detección e identificación de una gran variedad de retardantes de llama, siendo la técnica de GC-APCI-HRTOF-MS la que proporcionó mejores resultados, alcanzando límites de detección entre 0.5 y 25 pg inyectados. Comparando estos valores con los obtenidos mediante LC-HRTOF-MS, utilizando diferentes fuentes de ionización (ESI, APCI o APPI), se pudo comprobar que el método GC-APCI-HRTOF-MS proporciona mejores límites de detección excepto en el caso de los isómeros del hexabromociclododecano, para los que la técnica de LC-HRTOF-MS sigue siendo más adecuada. Por otro lado, el uso del GC×GC aporta ventajas en la identificación de nuevos retardantes de llama comparada con la GC convencional, debido a su mayor capacidad de separación. Es importante destacar que este artículo constituye la primera aplicación del acoplamiento GC×GC-APCI-HRTOF-MS al análisis de retardantes de llama tanto bromados como organofosforados.

“Evaluation of gas chromatography-atmospheric pressure chemical ionization-mass spectrometry as an alternative to gas chromatography-electron ionization-mass spectrometry: Avocado fruit as example”

Elena Hurtado-Fernández, Tiziana Pacchiarotta, Enrique Longueira-Suárez, Oleg A. Mayboroda, Aberto Fernández-Gutiérrez, Alegría Carrasco-Pancorbo.

Journal of Chromatography A 1313 (2013) 228-244.

En este estudio se evalúa el acoplamiento GC-APCI-QTOF-MS como alternativa a la GC-EI-MS para la caracterización de extractos de diversas variedades de aguacate con el objetivo de identificar y determinar los metabolitos presentes en este tipo de matriz. En la actualidad, el estudio del metaboloma en matrices de elevada complejidad sigue siendo un reto difícil de conseguir debido al gran número de compuestos presentes en los extractos y al hecho de que su naturaleza puede verse afectada por factores ambientales y/o genéticos. En general, las estrategias utilizadas en su determinación se basan en el uso de técnicas



cromatográficas (GC y LC) acopladas a la espectrometría de masas dirigidas al análisis de familias específicas. Sin embargo, la detección de compuestos desconocidos requiere el uso de técnicas de cribado o screening de elevada sensibilidad que permitan su adecuada caracterización. En este caso, el uso de técnicas de ionización blandas, como la APCI, puede aportar ventajas frente a EI o CI, en especial cuando se trabaja con espectrometría de masas de alta resolución.

Antes de proceder al análisis de los metabolitos mediante GC-APCI-QTOF-MS fue necesario llevar a cabo la derivatización de los extractos debido a la naturaleza polar de los compuestos objeto de estudio. Una vez completada esta etapa mediante una reacción de sililación y optimizadas las condiciones de ionización APCI se procedió al análisis de los extractos mediante GC-APCI-QTOF-MS tanto en el modo de barrido completo o full-scan como MS/MS. Con el objetivo de comparar los resultados obtenidos con una técnica de referencia, los extractos fueron también analizados mediante GC-EI-QMS. La identificación de los compuestos se realizó con la ayuda de una nueva librería de espectros creada recientemente para el estudio especí-

fico de metabolitos mediante GC-APCI-MS y disponible on-line (<http://metams.lumc.nl>). Este estudio se completó con las librerías de espectros de EI disponibles comercialmente (NIST 2010, Willey 2007, Fiehn Lib Metabolite GC/MS library 2009). El método GC-APCI-QTOF-MS desarrollado permitió la identificación de alrededor de 100 metabolitos, pertenecientes a familias tan diversas como aminoácidos, ácidos grasos y compuestos relacionados, azúcares y derivados, ácidos fenólicos, flavonoides, ácidos orgánicos y nucleósidos y nucleobases. La identidad de estos compuestos pudo ser confirmada por GC-EI-QMS, observándose una buena concordancia entre las identificaciones realizadas según los espectros obtenidos mediante EI-MS y APCI-MS/MS. En base a los resultados obtenidos, los autores proponen la utilización del acoplamiento GC-APCI-QTOF-MS para el análisis de matrices biológicas debido a la versatilidad y robustez de la fuente de APCI.

Francisco Javier Santos Vicente
Departamento de Química Analítica
Universidad de Barcelona (UB)



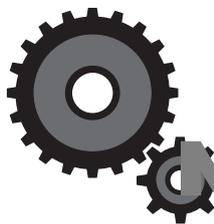
EMPRESAS colaboradoras

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 ANALÍTICA, S.A.**
Camí de Can Calders, 14
08173 SANT CUGAT DEL VALLÉS
(Barcelona)
- **THERMO FISHER SCIENTIFIC**
Valportillo I, 22; 1ª Planta
Edificio Caoba
28108 ALCOBENDAS (Madrid)
- **WATERS CROMATOGRAFÍA, S.A.**
Ronda Can 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 Edf. Best Point Of. 9-12
Polígono Empresarial San Fernando
28830 SAN FERNANDO DE HENARES (Madrid)
- **INGENIERÍA ANALÍTICA, S.L.**
Avenida Cerdanyola, 73
08172 SANT CUGAT DEL VALLÉS (Barcelona)
- **IZASA, S.A.**
Aragoneses, 13
Polígono Industrial Alcobendas
28108 ALCOBENDAS (Madrid)
- **LECO INSTRUMENTOS, S.L.**
Avda. de la Industria, 43
28760 TRES CANTOS (Madrid)
- **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
Tif.: 902 13 02 02
oferta@carburos.com
- **SUGELABOR**
Sicilia, 36
28038 MADRID
- **VWR INTERNATIONAL - EUROLAB, S.L.**
Calle de la Tecnología, 5-17
A7 - Llinars Park
08450 Llinars del Vallés (Barcelona)



NOVEDADES TÉCNICAS

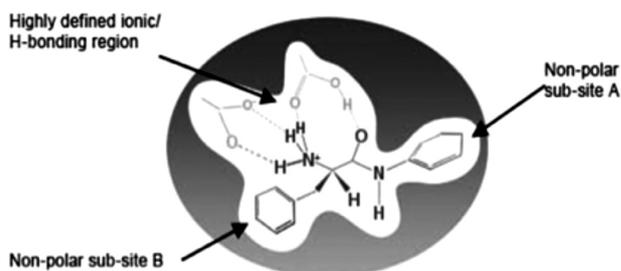
SIGMA-ALDRICH®

SUPELMIP™ SPE – PAHS

ANÁLISIS DE HIDROCARBUROS POLIAROMÁTICOS EN ACEITES

La tecnología MIP (Molecular Imprinting Polymer) permite dar una solución sencilla, rápida y económica al análisis de trazas en aceites (oliva, girasol, colza, etc).

Con un protocolo similar al de muchos otros cartuchos de SPE, en tres etapas se consigue una extraordinaria limpieza de los extractos de PAHs en aceites vegetales.



Protocol for Extraction of PAHs – General Procedure:

Sample Pre-treatment

For solid/tissue samples:

- Extract PAHs into hexane or cyclohexane using 0.5-1 g of sample

For liquid samples:

- For oil/fat samples dilute 1:1 with cyclohexane
- For water-containing samples: extract into hexane or cyclohexane

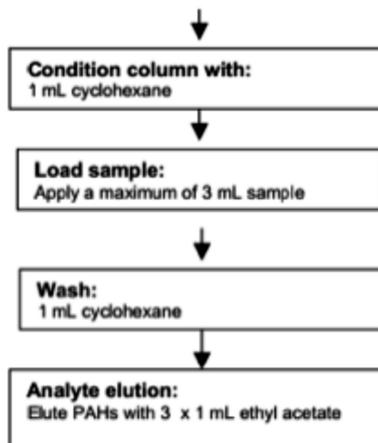
Note: I.S. is recommended for accurate quantitation.

The use of toluene, ethyl acetate, methanol or diethyl ether is not recommended for load and wash solvents.

Recommended flow rate during sample load is ≤ 1 mL/min. If possible use gravity flow during the sample load step.

A flow rate of 0.5-1 mL/min. is recommended for each wash step.

Recommended flow rate during elution is ~ 0.5 mL/min



2-3 mL cyclohexane may be used if cleaner extracts are needed

Apply a gentle vacuum (-0.4 bar or -12 in Hg for 5-10 s) between each wash step unless noted otherwise.

Evaporate the elution solvent to dryness and reconstitute in ethyl acetate:hexane (1:1) for GC analysis or in the mobile phase for LC analysis

Note: PAHs lighter than chrysene can be lost during evaporation

Disponibles muestras para que Ud. pruebe con su matriz grasa.

www.sigmaaldrich.com/supelmip

Información y muestras: Ludwig Ortner Tel. 91 661 99 77, e-mail: ludwig.ortner@sial.com

EL CATÁLOGO DE SUPELCO HA LLEGADO



El NUEVO catálogo impreso de Supelco ya está disponible desde Abril de 2013. Herramienta imprescindible para todo cromatografista.

- Más de 15.000 productos de alta calidad para cromatografía y productos de analítica.
- Aproximadamente 2.500 nuevos productos.
- Estándares y reactivos de las marcas Supelco y Fluka.
- Cientos de aplicaciones con cromatograma
- Más que una lista de productos – un apreciado recurso técnico.

Solicite su ejemplar ahora en:

www.sigmaaldrich.com/analytical-chromatography/supelco-catalog/request.html

o llame al 900 10 13 76

Aplicaciones cromatográficas

Supelco (parte de Sigma-Aldrich) pone a su entera disposición la más extensa base datos de aplicaciones cromatográficas. Simplemente haciendo clic en:

www.sigmaaldrich.com/ifb/supelco/applications-guide/sup-applications-chromatography.html#I





Thermo SCIENTIFIC

DETECTOR DE AEROSOL CARGADO THERMO SCIENTIFIC DIONEX CORONA VEO

Detecta aquello que otros detectores universales no ven

Introducción

No existe un detector para cromatografía de líquidos (LC) que proporcione resultados ideales. Quizás la característica más deseada en un detector es la capacidad de analizar de forma exacta y precisa un amplio rango de compuestos con una respuesta consistente y uniforme para todos ellos.

Habitualmente, un analito responde más que otros, o simplemente no responde nada en un detector particular. El detector UV requiere que la molécula contenga un cromóforo y la respuesta entre analitos varía ampliamente según la naturaleza del cromóforo presente. El detector de índice de refracción no puede utilizarse en elución en gradiente y es sensible a la temperatura. La espectrometría de masas sólo puede analizar compuestos que formen iones en fase gas. Y el detector evaporativo de dispersión de luz muestra variación en la respuesta entre analitos y curvas de calibrado complejas y no lineales.

El detector de aerosol cargado (CAD) es una tecnología revolucionaria que proporciona una respuesta consistente para compuestos no volátiles y la mayoría de compuestos semi-volátiles a niveles sub-nanogramo en columna y a lo largo de un amplio rango dinámico. Este detector no requiere que la molécula contenga un cromóforo o sea capaz de ionizarse (Figura 1). La variación de respuesta entre analitos es mínima e independiente de la estructura química, desde azúcares simples a proteínas. Finalmente, este detector no condiciona los procesos de separación al ser un detector completamente compatible con elución en gradiente.

Funcionamiento del detector

El principio de operación de este detector se ilustra en la Figura 2. Básicamente, el detector convierte el efluente de la columna en un aerosol seco y aplica una carga eléctrica a las partículas, de manera que la cantidad de carga medida por el electrómetro es proporcional a la masa del compuesto. Los procesos que tienen lugar en el detector son:

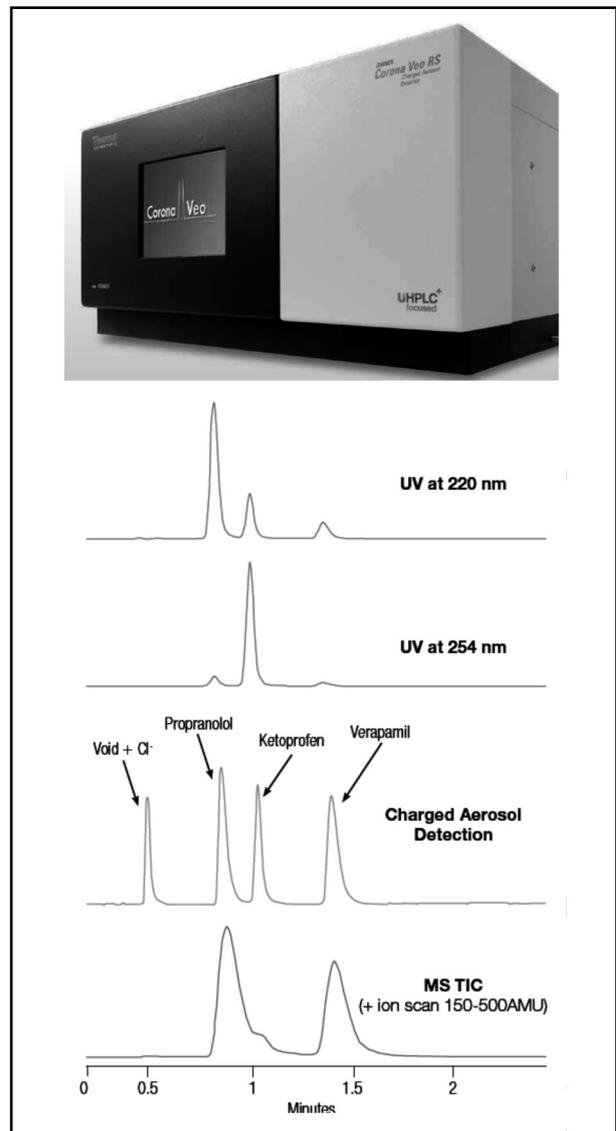


Figura 1: Arriba: detector Thermo Scientific Dionex Corona VEO; Abajo: comparación de la respuesta de detectores UV, CAD y MS. Obsérvese la ausencia de respuesta para todos los compuestos con detector UV y MS, así como la uniformidad de respuesta para el detector CAD.

- 1) El eluyente de la columna cromatográfica entra en el detector.
- 2) Se produce la nebulización neumática del eluyente.
- 3) Las gotas más pequeñas entran en el tubo de secado y forman partículas una vez que el disolvente es evaporado.
- 4) Las gotas más grandes se expulsan por el drenaje.
- 5) Las partículas secas entran en la cámara de mezcla.
- 6) El flujo de gas del detector pasa a través de la aguja de descarga (corona).

- 7) El gas cargado colisiona con las partículas del aerosol, transfiriéndoles carga.
- 8) El gas ionizado sin reaccionar es eliminado.
- 9) Las partículas cargadas remanentes son analizadas.
- 10) La señal originada se transfiere al software cromatográfico.

La respuesta del detector está directamente relacionada con la masa de compuesto que entra en el detector. Un incremento en la cantidad de compuesto que entra en el detector conlleva un incremento en el tamaño de las partículas que se forman en el detector. Las partículas más grandes pueden acomodar más carga, resultando en una mayor respuesta en el detector. Siempre que un compuesto forme una partícula en el proceso de nebulización y desolvatación podrá ser analizado mediante detección de aerosol cargado, independientemente de su estructura química.

Características del detector

El detector Thermo Scientific Dionex Corona Veo mejora las capacidades y extiende las ventajas de la detección de aerosol cargado frente a versiones precedentes. Las principales características del detector son:

- 1) Respuesta independiente de la estructura química. Una elección excelente para la medida relativa cuando no hay patrones disponibles (estudios de impurezas o degradación).
- 2) Excelente sensibilidad, sub-nanogramo en columna, independiente del flujo de fase móvil (detector de masa).

- 3) Amplio rango dinámico, hasta 4 órdenes de magnitud, que permite analizar en el rango pg a µg en columna (por ejemplo, permite medida simultánea de principios activos farmacéuticos e impurezas a niveles < 0.05% en un mismo análisis).
- 4) Amplio rango de aplicación que permite analizar cualquier compuesto no volátil y la mayoría de semi-volátiles, sin necesidad de cromóforos o ionización.
- 5) Compatible con HPLC, UHPLC y micro LC al permitir flujos de trabajo entre 0.01 y 2.0 ml/min
- 6) Compatible con operación en gradiente.
- 7) Operación simple e intuitiva, sin requisitos de optimización.
- 8) Integración sencilla en cualquier sistema cromatográfico, HPLC, UHPLC o SFC de cualquier fabricante.
- 9) Detección complementaria ortogonal a la proporcionada por los detectores UV y MS.

Amplio rango de aplicación

El detector Thermo Scientific Dionex Corona Veo proporciona resultados previsibles sin necesidad de una optimización compleja. Este detector puede utilizarse en un amplio rango de aplicaciones tanto en investigación básica como en procesos de control de calidad. En la Figura 3 se muestran algunos ejemplos:

- 1) Lípidos
- 2) Polímeros
- 3) Fármacos
- 4) Azúcares

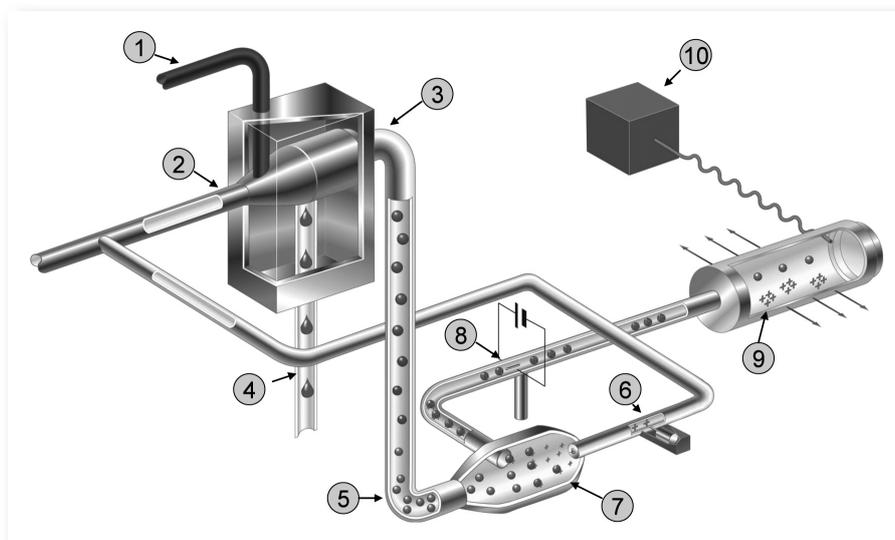


Figura 2: Esquema de funcionamiento del detector de aerosol cargado.

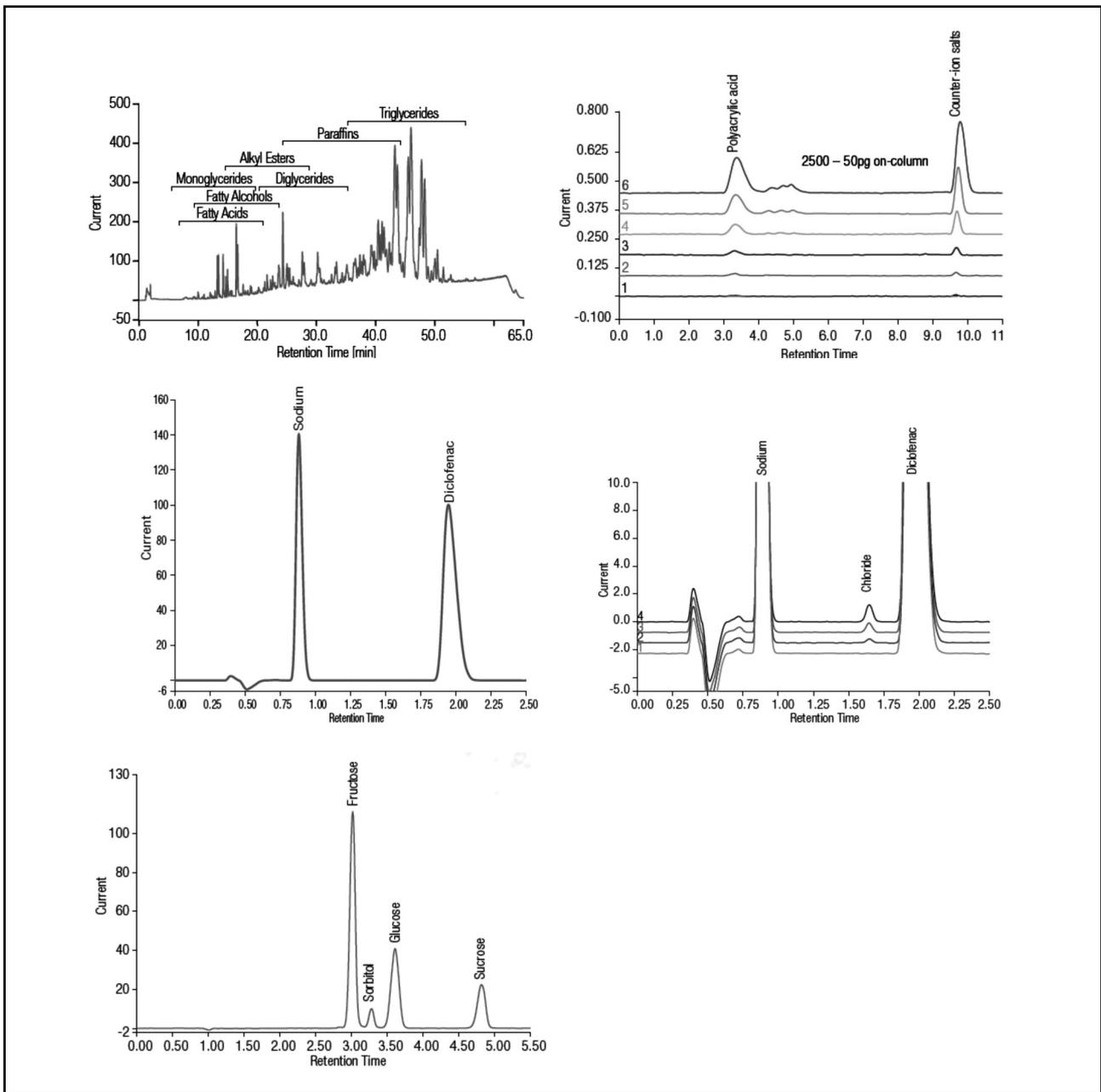


Figura 3: Ejemplos de aplicación del detector de aerosol cargado. Arriba-izquierda: análisis de lípidos en aceite de algas. Arriba-derecha: ácido poliacrílico en agua de refrigeración. Centro: análisis rápido de diclofenaco, contraión e impurezas. Abajo-izquierda: análisis de azúcares en zumo de manzana.



MERCK MILLIPORE LAB SOLUTIONS PRESENTA LA POSIBILIDAD DE VER SU CONFERENCIA VIRTUAL “SOLUCIONES COMPLETAS PARA ANÁLISIS DE SEGURIDAD ALIMENTARIA” BAJO DEMANDA

11 de diciembre de 2013, Darmstadt, Alemania—Merck Millipore, la división de Ciencias de la Vida de Merck KGaA, anunció hoy la posibilidad de ver bajo demanda su Conferencia virtual de Lab Solutions.

El tema de la conferencia, «Análisis de seguridad alimentaria», reunió a expertos de la industria de todo el mundo el 19 y el 20 de Noviembre para debatir diferentes aspectos de este tema cada vez más importante, entre ellos el análisis microbiológico de los alimentos y las bebidas, el control y la regulación medioambiental, y el impacto del uso de materiales de alta calidad en los estudios analíticos. Los visitantes que no pudieron asistir a la conferencia virtual el pasado mes, pueden visitar ahora la [página web](#) cuando tengan tiempo.

La Conferencia virtual *Lab Solutions* consta de tres seminarios virtuales:

- **“La Normalización ISO® en microbiología alimentaria y calidad de los medios”** impartido por la ponente Barbara Gerten, Directora de I+D, Jefa de Materias primas y normativa, Merck Millipore BioMonitoring R&D.
- **“La importancia de la calidad del agua en el análisis de alimentos”** presentado por la Dra. Estelle Riché, Científico Senior, Aplicaciones y Formación, Merck Millipore Lab Water.
- **“Columnas monolíticas Chromolith® – Una herramienta ideal para el análisis de muestras de alimentos con matrices complejas «sucias»”** impartido por el ponente Dr. Egidijus Machtejevas, Director de Producto de Cromatografía Analítica, Merck Millipore Lab Essentials.

Además, los visitantes podrán acceder a otras zonas del evento, entre ellas el **Salón de exposiciones *Lab Solutions***, donde encontrarán cuatro stands relacionados con el tema de la conferencia “Análisis de seguridad alimentaria” (Cromatografía, Análisis microbiológico de los alimentos y las bebidas, Control medioambiental y Mercado regulado), así como el **Salón de colaboradores**, donde encontrarán editores y expertos de la industria de algunas de las principales publicaciones de ciencias de la vida: Advantage Business Media, Lab Manager, The Scientist, LCGC y SelectScience.com

También la **Biblioteca de recursos** estará a disposición de los visitantes, quienes podrán revisar y descargar datos nuevos y estimulantes, resúmenes y vídeos, así como artículos científicos.

Visite hoy mismo la **página web de la Conferencia virtual *Lab Solutions*** (<https://engage.vevent.com/index.jsp?eid=2484&seid=425>), donde podrá registrarse para verla bajo demanda.

Sobre Merck Millipore

Merck Millipore es la división de Ciencias de la Vida de Merck KGaA (Alemania) y ofrece una amplia gama de innovadores y eficientes productos, servicios y relaciones comerciales que permiten el éxito de nuestros clientes en investigación, desarrollo y producción de terapias biotecnológicas y farmacéuticas. Merck Millipore aúna todos sus esfuerzos en la apertura de nuevos campos científicos y de ingeniería y, siendo uno de los tres principales inversores en I+D de la industria de herramientas en ciencias de la vida, actúa como socio estratégico para los clientes contribuyendo al avance de las ciencias biológicas.

Con sede central en Billerica (Massachusetts, EE.UU.), la división cuenta con más de 10.000 empleados, opera en 66 países y ha obtenido unos ingresos de 2.600 millones de euros en 2012. Merck Millipore se conoce como EMD Millipore en los Estados Unidos y Canadá.

Millipore y Chromolith son marcas registradas, y Merck Millipore y la marca M son marcas comerciales, de Merck KGaA. Todas las demás marcas comerciales son propiedad de sus respectivos propietarios.

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 2014

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, SO₂, 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

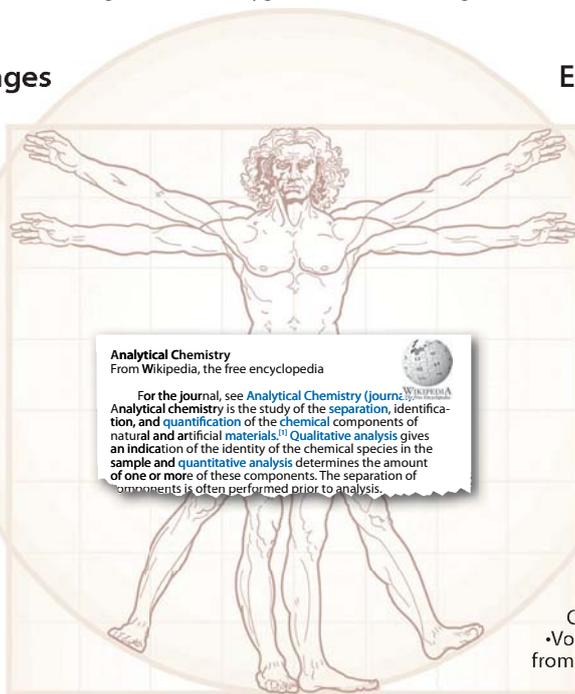
- Metal content in plastics such as toys
- Dyes and softeners leachable from plastic ware
- Cosmetics & Personal Care Products
- Volatiles & Leachables from Materials

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



Respaldao 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
- Estándares Químicos
- Productos para Valoraciones

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

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

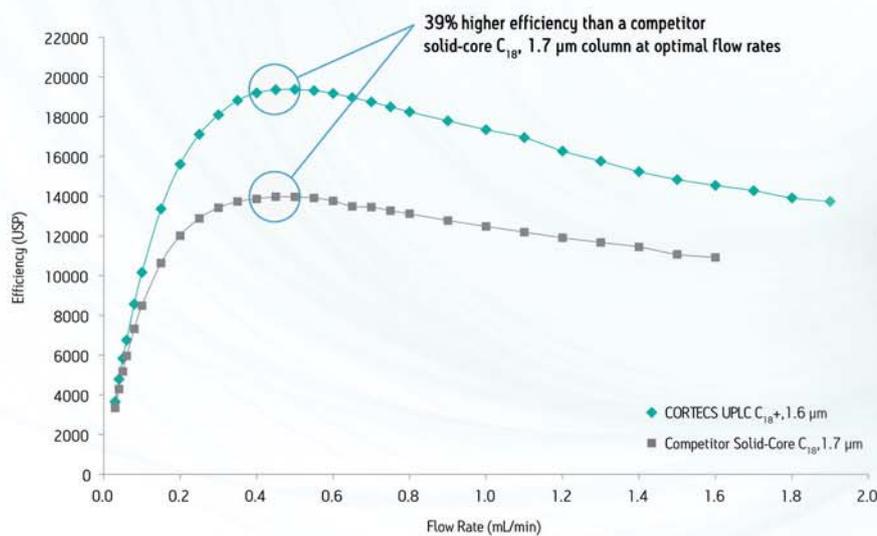
sigma-aldrich.com/analytical

SIGMA-ALDRICH®

EFICACIA INIGUALABLE.

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

CORTECS™
COLUMNS



Comparative separations may not be representative in all applications.



Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.®

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